

# **Reale photonische Kristalle und neue Anwendungsfelder in der Nanotechnologie**

## **Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik  
der Technischen Universität Ilmenau

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Thomas Haas

geb. am 04. September 1975 in Eisenach

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. T. Doll  
Prof. Dr. rer. Nat. habil. S. Sinzinger  
Prof. Dr. A. Scherer

Eingereicht am: 01.06.2006

Verteidigt am: 19.05.2007

urn:nbn:de:gvb:ilm1-2007000148



## Kurzzusammenfassung

In der Arbeit werden die grundlegenden theoretischen Beziehungen und Berechnungsmethoden für die Lösungen von photonischen Kristallen, photonischen Lichtwellenleitern und Luftwellenleitern aufgezeigt. Daraus resultieren die Berechnungen für reale Kapillarwellenleiter mit Taschen, wie sie durch einen Verziehprozess von dicht gepackten zylindrischen Preformen entstehen. Dabei werden unterschiedliche honigwabenartige Gitterstrukturen für die Approximation des Mantels analysiert. Die reale Struktur mit Taschen weist dabei die größte photonische reale Bandlücke von 7,07% auf. Im Gegensatz zu den hexagonalen Kapillarluftwellenleitern existiert nur der ausbreitungsfähige fundamentale Mode innerhalb der Bandlücke und keine Oberflächenmoden, die durch herstellungsbedingte Fluktuationen zu Verlusten führen würden.

Omnidirektionale (3D) Bandlücken für  $2\frac{1}{2}$  honigwabenartige, quadratische und hexagonale photonische Kristalle werden erstmals analysiert. Die Berechnungen basieren auf der ebenen Wellenmethode für einen zweidimensionalen photonischen Kristall mit einem Wellenvektor entlang der z-Achse mit  $k_z = k_0 \sin(\theta)$ . Dabei werden der Brechungsindex, der Einstrahlwinkel und die verschiedenen Radien über einen real herstellbaren Bereich variiert. Omnidirektionale Bandlücken ergeben sich in einem Radiusbereich zwischen  $R=0,34$  und  $R=0,5$  bei einem minimalen Brechungsindex von 3 mit relativen Bandlücken von 2,7% bis 10%.

Eine Kombination von realen photonischen Lichtwellenleitern, zweidimensionaler Bandstruktur-Berechnung mit entkoppelten Moden oder omnidirektionalen Kristallen für höhere Energiedichten ermöglichen ein neues photonisches Nahfeld-Tool, das eine Visualisierung bei gleichzeitiger Manipulation der Oberfläche realisiert.



## Abstract

This work presents basic theoretical methods to calculate photonic crystals, photonic fibers and air core fibers. Based on those methods, realistic capillary photonic fibers with pockets, which are built up by a stack-and-draw process for a closed packed bunch of preforms are shown. The approximation of several honeycomb photonic crystal structures are analyzed where the real photonic fiber provides the largest relative bandgap of 7.07%. In opposite to hexagonal capillary fibers only the fundamental mode exists within the bandgap and no surface mode could stimulate, which would increase losses.

Omnidirectional (3D) band gaps can evolve in  $2\frac{1}{2}$  honeycomb and squared photonic crystal lattices and also in hexagonal crystals. This study presents a study of the according full parameter space. The calculation of omnidirectional photonic bands is based on the plane wave method for a two-dimensional photonic crystal with an off-plane wave vector  $k_z = k_0 \sin(\theta)$ . The results are fully respecting the parameters index of refraction, the angle of incidence, as well as the structure radii. Omnidirectional band gap are found for radii between  $R=0.34$  and  $R=0.5$ , starting with index values from 3.0 and show maximum relative band gap sizes ranging from 2.7% up to 10%.

A combination of real photonic hollow core fibers, two-dimensional band calculations with decoupled modes or omnidirectional photonic crystals which allow higher energy density provide new photonic nanotool to visualize and modify a surface beneath the tool at the same time.



# **I Inhaltsverzeichnis**

<b>I</b>	<b>INHALTSVERZEICHNIS</b>	<b>I</b>
<b>1</b>	<b>EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>ELEKTROMAGNETISCHE THEORIE DES LICHTES</b>	<b>3</b>
2.1	Maxwell-Gleichungen	5
2.2	Grenzbedingungen	5
2.3	Integral- und Differenzialdarstellung	7
<b>3</b>	<b>PERIODISCHE STRUKTUREN UND KRISTALLE</b>	<b>11</b>
3.1	Fourier-Analyse	11
3.2	Kristallgitter und Bragg-Bedingung	20
<b>4</b>	<b>WELLENAUSBREITUNG IN PERIODISCHEN STRUKTUREN</b>	<b>25</b>
<b>4.1</b>	<b>2x2-Matrix-Methode</b>	<b>26</b>
4.1.1	Reflexion und Transmission an einer Grenzschicht	27
4.1.2	Einzelschicht	32
4.1.3	Multischichtsystem	35
4.1.4	Bragg-Stack	39
4.1.5	1D omnidirektionaler photonischer Kristall	43
<b>4.2</b>	<b>Ebene Wellenmethode</b>	<b>44</b>
4.2.1	1D photonischer Kristall	47
4.2.2	2D photonischer Kristall	48
4.2.3	Superzellen-Berechnung	50
<b>4.3</b>	<b>Photonische Lichtwellenleiter</b>	<b>54</b>
4.3.1	Transversale und Longitudinale Wellengleichung	56
4.3.2	Expansion mit trigonometrischen Funktionen	58
4.3.3	Hermite-Gauß-Expansion	60
4.3.4	Opposite-parity	65
4.3.5	Dispersion	68
4.3.6	V-Parameter	72

4.3.7	Effektive Fläche	73
<b>5</b>	<b>REALE KAPILLARLICHTWELLENLEITER</b>	<b>75</b>
5.1	Kapillarluftwellenleiter	77
5.2	Kapillarwellenleiter	84
<b>6</b>	<b>OMNIDIREKTIONALE 2D PHOTONISCHE KRISTALLE</b>	<b>87</b>
<b>7</b>	<b>AUSBLICK</b>	<b>95</b>
<b>A</b>	<b>ANHANG</b>	<b>97</b>
A.1	Kristallgittertypen	97
A.2	Ebene Wellenmethode	108
A.3	Omnidirektionale 2D Kristalle	111
A.4	Photonische Wellenleiter	119
A.4.1	Ebene Wellenmethode für das transversale Feld	119
A.4.2	Hermite-Gauß-Basisfunktionen	124
A.5	Mathematische Grundlagen	133
A.5.1	Vektoranalyse	133
A.5.2	Hermite-Funktionen $H_n$	134
A.5.3	Laguerre-Funktionen $L_n^m$	136
A.6	Fourier-Transformation	137
A.6.1	Rechenregeln für die Fourier-Transformation	137
A.6.2	Fourier-Transformation wichtiger Funktionen $f(x)$ im $\mathbb{R}^1$	138
A.6.3	Fourier-Transformation wichtiger Funktionen $f(x,y)$ im $\mathbb{R}^2$	138
A.7	Fundamentale Konstanten	139
<b>B</b>	<b>LITERATUR</b>	<b>141</b>
B.1	Literatur	141



# 1 Einleitung

In den letzten Jahren ist die Anzahl an Publikationen über photonische Kristalle rasant angewachsen. Photonischen Kristalle sind periodische, meist dielektrische Strukturen, mit einer Variation des Brechungsindex in der Größenordnung der Wellenlänge die durch eine photonische Bandlücke charakterisiert werden. Diese stellt - ähnlich dem aus der Halbleiterphysik bekannten Phänomen der elektronischen Bandlücke - einen „verbotenen“ Frequenzbereich für das Licht dar. Eine elektromagnetische Welle einer Frequenz innerhalb der Bandlücke wird durch die periodische Struktur des Kristalls vollständig reflektiert. Dies erlaubt die Herstellung von hoch reflektiven Spiegeln. Durch das gezielte Einbringen von Defektstrukturen in einen photonischen Kristall wird die Manipulation von Licht ermöglicht. Es ergeben sich eine große Anzahl an möglichen Einsatzgebieten wie Wellenleiterstrukturen [1-6] für die Informationsübertragung auf einem Chip, verschiedene Arten von Filtern, Prismen, optischen Resonatoren [7-10] hoher Güte und Lichtwellenleiter [11-15], um nur einige Anwendungsfelder zu nennen. Allerdings ist der Euphorie der ersten Jahre eine Phase der Ernüchterung gefolgt, da es eine große Herausforderung darstellt, photonische Kristalle mit den benötigten Genauigkeiten und einem hohen Brechungsindexkontrast über einen großen Bereich herzustellen. Ein weiteres Problem ist die Komplexität der Berechnungen realer Strukturen. In dieser Arbeit werden Wege aufgezeigt, die es ermöglichen, reale, durch den Herstellungsprozeß entstehende Strukturen abzubilden und analytisch in einer kompakten und effizienten Form zu lösen. Des Weiteren werden Kristallstrukturen aufgezeigt, die bei reduzierter Dimension (2D) eine omnidirektionale Bandlücke (3D) aufweisen.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Im zweiten Abschnitt wird ein historischer Abriss über die Entwicklung der Elektrodynamik gegeben. Darüber hinaus werden die Maxwell-Gleichungen in Integral- und Differentialform mit den allgemeinen Bedingungen an einer Grenzschicht dargestellt.

Das dritte Kapitel widmet sich der Beschreibung von periodischen Funktionen und Kristallgittern. Für die Berechnung der Wellenausbreitung in periodischen dielektrischen Strukturen werden detailliert die Grundlagen der Fourier-Transformation dargestellt. Anhand des einfachen quadratischen Gitters wird die analytische Lösung der Fourier-Transformation über die Bessel-Funktionen erster Ordnung gezeigt. Diese Lösung ist auf beliebige Gitterstrukturen im 2D erweiterbar, wie dies für eine Vielzahl an möglichen photonischen Kristallgittertypen im Anhang dargestellt wird. Die kleinste Struktureinheit eines Kristalls ist die Basiszelle, welche das grundlegende physikalische Verhalten beschreibt. Es werden die Translationseigenschaften und die reziproken Gittervektoren eingeführt und die Brillouin-Zone und die Bragg-Bedingung erläutert.

Die in dem vierten Kapitel beschriebenen Methoden wurden in MatLab implementiert und bilden den Ausgangspunkt für die Betrachtungen realer und omnidirektionaler zweidimensionaler Kristalle. Die Grafiken verifizieren die Berechnungen und veranschaulichen die Herleitungen in diesem Kapitel. Anhand der bekannten 2x2-Matrix-Methode werden Grundlagen bei der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen für eine dünne Schicht und Multischichtsysteme hergeleitet, bis hin zur Beschreibung omnidirektionaler eindimensionaler Kristalle die eine Reflektion von elektromagnetischen Wellen für unterschiedliche Einstrahlwinkel ermöglichen. Darauf aufbauend wird die allgemeine Lösung der Maxwell-Gleichungen durch die ebene Wellenmethode für ein beliebig periodisches Medium beschrieben. Diese wird durch die analytischen Lösungen der Fourier-Transformation des periodischen Gitters effektiv implementiert. Die Berechnung perfekter Kristalle wird auf Superzellen, die aus mehreren symmetrisch angeordneten Basiszellen bestehen, erweitert. Dies erlaubt durch Einbringen einer Defektstruktur die Analyse der Moden in einem Kristall. Die Berechnung für photonische Lichtwellenleiter stellt einen weiteren Abschnitt des Kapitels dar. Nach der Herleitung der longitudinalen und transversalen Wellengleichung werden Lösungen hergeleitet, die eine effektive Berechnung von Lichtwellenleitern ermöglichen. Der erste Ansatz beschreibt die Lösung, in Anlehnung an die ebene Wellenmethode, über trigonometrische Polynome. Eine zweite Lösung des komplexen Differentialgleichungssystems erfolgt über die Hermite-Gauß-Funktionen. Die überlappenden Integrale sind analytisch lösbar, wie im Anhang beschrieben, was den entscheidenden Vorteil dieser Methode darstellt.

Im fünften Kapitel wird die Herstellung von photonischen Lichtwellenleitern durch den Verziehpzprozess gezeigt. Bei der Herstellung von Lichtwellenleitern entstehen zwischen den Kapillaren Luftdefekte, die so genannten Taschen. Die reale Geometrie der Taschen wird erstmals für einen honigwabenartigen Luftwellenleiter analysiert und mit weiteren möglichen Approximationen der realen Struktur verglichen. Die Berechnungen basieren dabei auf der implementierten ebenen Wellenmethode. Es wird ein Vergleich zwischen unterschiedlichen Gittern realer Kapillarluftwellenleiter durchgeführt und eine Analyse der ausbreitungsfähigen Moden und des Einflusses von Oberflächenmoden vorgenommen.

In dem sechsten Kapitel wird eine vollständige Herleitung für omnidirektionale photonische Kristalle dargelegt und erstmals omnidirektionale Bandlücken für das honigwabenartige, das hexagonale, das quadratische und das modifiziert quadratische Gitter über den technologisch interessanten Bereich durch die Variation der Radien und der unterschiedlichen Brechungsindizes dargestellt.

Diese unterschiedlichen Berechnungen sind die Grundlage für Überlegungen zu einem neuen Nahfeld-Tool, wie dies im Ausblick vorgeschlagen wird. Es werden erste Lösungsansätze unter der Verwendung von Glas als Material und der Überlagerung unterschiedlicher Bandlücken aufgezeigt, die eine Umsetzung eines solchen Nahfeld-Tools ermöglichen könnten.

## **2      Elektromagnetische Theorie des Lichtes**

Erste Versuche, optische Erscheinungen zu beschreiben, gehen auf Platon (427 v.Ch.-347 v.Ch.) zurück. Er dokumentierte die Brechung von Licht durch ein in Wasser getauchtes Ruder. Später verfasste Euklid von Alexandria (ca. 365 v.Ch.-300 v.Ch.) eine Abhandlung über die Optik. Er bemühte sich die Erscheinungen in eine mathematische Form zu bringen. Mit J. Kepler (1571-1630) beginnt die moderne geometrische Optik. Er fasste einen Lichtstrahl als rein geometrisches Gebilde auf, wodurch er den Strahlenverlauf durch Linsen beschrieb. Kepler suchte nach dem Brechungsgesetz, welches ca. 1601 durch T. Harriot (1591-1626) entdeckt wurde. In der Literatur wird meist W. van Roijen Snell (1591-1626) genannt, der 1621 erneut das Brechungsgesetz fand. Er publizierte seine wissenschaftlichen Abhandlungen unter dem Namen Snellius; diesen Namen trägt das Gesetz noch heute. Im auslaufenden 17. Jahrhundert begründete I. Newton (1642-1727) die Korpuskulartheorie. Er zerlegte weißes Licht mit einem Prisma und beschrieb Licht als einen Strom kleiner Teilchen, wobei weißes Licht aus Korpuskeln unterschiedlicher Farben zusammengesetzt ist. Jedoch bereits C. Huygens (1629-1695) erkannte, in Anlehnung an die Schallwellen, dass Licht eine Wellennatur besitzt. Diese Deutung lässt eine Beschreibung zweier grundlegender Phänomene der Lichtwellenausbreitung zu, zum einen die Interferenz und zum anderen die Beugung. T. Young (1773-1829) wies bei seinen Experimenten 1807 die Überlagerung von Lichtwellen nach. Dabei ließ er einen parallelen Sonnenstrahl durch zwei Lochblenden fallen und beobachtete in einem gewissen Abstand helle und dunkle Streifen, die Interferenz. Die mathematische Deutung wurde durch A. J. Fresnel (1788-1827) erbracht. Jede Wellenfront ist Ausgangspunkt von Elementarwellen, die durch Interferenz (Überlagerung) die weitere Ausbreitungsrichtung bestimmen. Erste Experimente zur Beugung wurden von J. Fraunhofer (1787-1826) an optischen Gittern durchgeführt.

C. A. de Coulomb (1736-1806) entwickelte 1785 eine an Newtons Gravitationsgesetz ausgerichtete Theorie der Elektrizität. In seiner Theorie ging er von zwei Teilchenarten aus, einer positiven und einer negativen, wobei sich gleichartige Ladungen abstoßen und entgegengesetzte Ladungen anziehen, mit einer Kraft, die umgekehrt proportional dem Entfernungsquadrat und dem Produkt der Ladungen ist. Eine mathematische Beschreibung der Coulomb'schen-Theorie wurde durch S. D. Poisson (1781-1840) auf der Grundlage der Potentialtheorie für die Newtonsche Gravitation erstellt. A. M. Ampere (1775-1836) erklärte den Begriff des elektrischen Stroms. Es gelang ihm, die Kraftwirkung eines Stromes auf einen Magneten und die Wechselwirkung elektrischer Ströme in ein mathematisches Grundgesetz zu fassen. Ampere postulierte den noch heute für die Gesamtheit aller elektromagnetischen Erscheinungen verwendeten Begriff der Elektrodynamik. M. Faraday (1791-1867) entwickelte mit seinen sehr detaillierten

Experimenten [16] eine Reihe bedeutender Beiträge zur Feldtheorie. Er führte den Begriff der Kraftlinien ein und entdeckte das elektromagnetische Induktionsgesetz. Faraday schrieb: „Bewegt man einen Draht in der Nähe eines Magneten, dann wird im Draht ein elektrischer Strom erzeugt. Von der Bewegung allein kann dieser nicht erzeugt werden. Dies beweist, dass um den Magneten herum und durch diesen erhalten, ein Zustand bestehen muß, in dessen Wirkungsbereich der Draht sich befindet. Diesen Zustand nenne ich den elektrotonischen Zustand. Dies beweist, dass die Kraftlinien eine physikalische (materielle) Existenz haben“ [17]. Faraday erkannte: „Allmählich wurde ich zu der Auffassung geführt, daß Licht eine hochfrequente Art von Schwingungen der Kraftlinien ist“ [18]. J. C. Maxwell (1832-1879) schrieb „Als ich nun Faradays Ideen, wie ich sie verstand, in mathematische Form brachte, fand ich, daß die aus denselben fließenden Resultate im allgemeinen vollständig mit denen der Mathematiker zusammenfielen. Beide Methoden geben von dem Verlauf derselben Erscheinungen Rechenschaft und beide lieferten dieselben Wirkungsgesetze. Aber während Faradaysche Methode in einer Deduction des Besondern aus dem Allgemeinen bestand, beruht die mathematische Methode auf dem synthetischen Aufbau des Allgemeinen aus dem Besondern“ [19]. Durch das Studium vor allem der Experimente von Faraday, dem Amper'schen Verkettungsgesetz und dem Gauß'schen-Satz gelang es Maxwell, eine erste vollständige Darstellung des elektromagnetischen Feldes aufzustellen. Er stellte acht Gleichungen auf, die die Beziehung zwischen dem elektrischen und dem magnetischen Feld widerspiegelt [19]. Die Experimente, die W. E. Weber (1804-1891) und R. Kohlrausch (1840-1910) durchführten, verhalfen Maxwell zur Beschreibung der elektromagnetischen Theorie des Lichtes. Dabei bestimmten Weber und Kohlrausch das Verhältnis der elektrostatischen zu den elektrodynamischen Ladungseinheiten, die der Lichtgeschwindigkeit entsprach.

H. R. Hertz (1857-1894) zeigte die Richtigkeit der Maxwell'schen Theorie mit seinen Karlsruher Experimenten. Dabei beschäftigte er sich mit der Erzeugung elektrischer Schwingungen und der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen. Diese Experimente, welche die Brechung an dielektrischen Körpern und die Polarisierung zeigten, gelten als Beweis dafür, dass Licht und elektromagnetische Wellen wesensgleich sind.

## 2.1 Maxwell-Gleichungen

Die vier Grundgleichungen der Elektrodynamik zur Beschreibung elektromagnetischer Wellen tragen den Namen von J. C. Maxwell. In der heute verwendeten Form wurden sie 1892 von O. Heavisides (1850-1925) aufgestellt und lauten in Integralform [20-22]

$$\oint_C \mathbf{H} d\mathbf{l} = \iint_A \left( \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) d\mathbf{S} \quad (2.1)$$

$$\oint_C \mathbf{E} d\mathbf{l} = - \frac{\partial}{\partial t} \iint_A \mathbf{B} d\mathbf{S} \quad (2.2)$$

$$\oiint_A \mathbf{B} d\mathbf{S} = 0 \quad (2.3)$$

$$\oiint_A \mathbf{D} d\mathbf{S} = \iiint_V \rho dV \quad (2.4)$$

Die erste Gleichung stellt das durch Maxwell korrigierte Ampere'sche-Durchflutungsgesetz dar. Es beschreibt den Zusammenhang zwischen dem magnetischen Feld  $\mathbf{H}$  und der gesamten Stromdichte  $\mathbf{J}$  plus der zeitlichen Änderung des elektrischen Flusses  $\mathbf{D}$ . Gleichung (2.2) ist das Faraday'sche Induktionsgesetz, welches die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E}$  und die zeitliche Änderung der magnetischen Feldstärke  $\mathbf{B}$  verknüpft. Die beiden letzten Gleichungen sind die Gauß'schen-Gesetze für die magnetische Feldstärke  $\mathbf{B}$  und die elektrische Flussdichte  $\mathbf{D}$  mit der Flächenladungsdichte  $\rho$ .

## 2.2 Grenzbedingungen

Bei der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen, in periodischen dielektrischen Strukturen, kommt es zum Übergang von einem Medium in ein zweites Medium. Die Beziehungen der elektromagnetischen Felder an einer Grenzschicht werden im Folgenden allgemeingültig hergeleitet.

Es sei  $V$  ein endliches Raumgebiet, mit der stückweise stetigen Grenzfläche  $A$  und  $\mathbf{n}$  die vom Medium eins in das Medium zwei zeigende Flächennormale auf jedem Flächenelement  $d\mathbf{S}$ . Der elektrische Fluss  $\mathbf{D}$  durch das gesamte Randgebiet ist gleich der elektrischen Ladung  $\rho$  im Inneren des umrandeten Volumens Gl. (2.4), und der magnetische Fluss  $\mathbf{B}$  durch das Randgebiet ist Null Gl. (2.3). Die Integration über einen Zylinder (siehe *Abb. 2.1*) wobei die Deckflächen sich je in einem Medium befinden und die Höhe des Zylinders infinitesimal klein angenommen wird ( $h \rightarrow 0$ ), tragen zur

Auswertung der linken Seite der Integrale Gl. (2.3) und Gl. (2.4) nur die Deckflächen  $A_D$  bei.

$$\begin{aligned}\oint\oint_A \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dS &= (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} A_D \\ \oint\oint_A \mathbf{B} dS &= (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} A_D\end{aligned}\quad (2.5)$$

Ist die Flächenladungsdichte singulär und bildet auf der Grenzfläche eine idealisierte Flächenladung  $\rho$  aus, folgt die rechte Seite von Gl. (2.4) zu [20]

$$\iiint_V \rho dV = \rho A_D. \quad (2.6)$$

Der Vergleich der linken und rechten Seite der Integrale liefert

$$\begin{aligned}\rho &= (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} \\ 0 &= (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n}\end{aligned}\quad (2.7)$$

Die Normalkomponente der elektrischen Verschiebung  $\mathbf{D}$  macht einen Sprung um  $\rho$  an der Grenzfläche, während die Normalkomponente der magnetischen Flussdichte  $\mathbf{B}$  stetig von Medium eins in das Medium zwei übergeht.

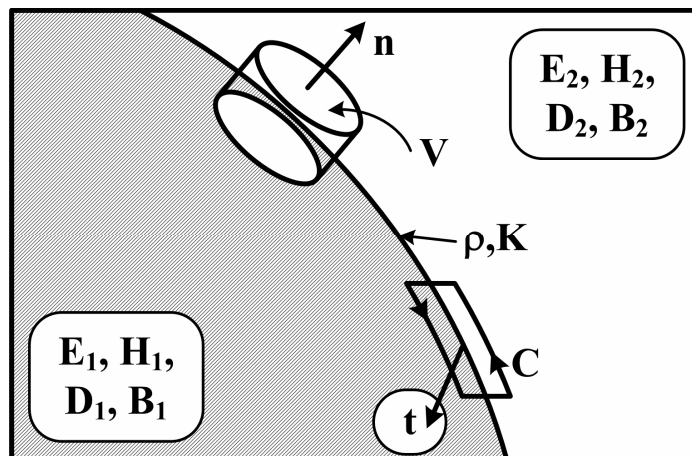


Abb. 2.1: Schematische Darstellung einer Grenzschicht zwischen zwei unterschiedlichen Medien mit idealisierter Flächenladungsdichte  $\rho$  und Flächenstromdichte  $K$  [20].

In analoger Weise erfolgt die Auswertung über den Stokes'schen Satz. Es sei  $C$  eine geschlossene Berandungskurve, die in beiden Medien dicht an der Grenzfläche liegt,  $d\mathbf{l}$  ein Linienelement der Berandungskurve  $C$ , wobei die Flächennormale  $\mathbf{n}$  senkrecht auf dem Flächenelement  $dS$  steht und die Richtung durch den Integrationsweg gegeben ist. Die elektrische Zirkulation über der Berandungskurve der Fläche  $A$  ist gleich der negativen zeitlichen Änderung des magnetischen Flusses  $\mathbf{B}$  durch die Fläche Gl. (2.2) und die magnetische Zirkulation über  $C$  von  $A$  ist äquivalent der gesamte Stromdichte  $\mathbf{J}$  plus der zeitlichen Änderung des elektrischen Flusses  $\mathbf{D}$  durch die Fläche Gl. (2.1). Die Auswertung der Integration, wobei die Seitenbegrenzung von  $C$  gegen Null tangiert, die Längsseiten  $l_L$  parallel zur Grenzfläche liegen und  $dB/dt$  an der Grenzfläche endlich ist, aber für ein infinitesimal kleine Fläche gegen Null strebt, folgt aus den ersten beiden Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \iint_A \left( \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) d\mathbf{S} &= \mathbf{K} \cdot \mathbf{t} l_L \\ \oint_C \mathbf{E} d\mathbf{l} &= (\mathbf{t} \times \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) l_L \end{aligned} \quad (2.8)$$

Die Flächenstromdichte  $\mathbf{K}$  wird als idealisiert angenommen und es ergibt sich für die Tangentialkomponenten

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) &= 0 \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) &= \mathbf{K} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes gehen stetig von einem Medium in das zweite über, wogegen das magnetische Feld an der Grenzfläche einen Sprung um  $\mathbf{K}$  in Richtung  $\mathbf{K} \times \mathbf{n}$  macht.

## 2.3 Integral- und Differenzialdarstellung

Die Darstellungen der Maxwell-Gleichungen sind gebräuchlicher in der differenziellen Form. Mit Hilfe der Integralsätze nach Stokes

$$\oint_C \mathbf{F} d\mathbf{l} = \iint_A (\nabla \times \mathbf{F}) d\mathbf{S} \quad (2.10)$$

und Gauß

$$\oint\oint_A \mathbf{F} d\mathbf{S} = \iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{F}) dV \quad (2.11)$$

können die Maxwell-Gleichungen in die jeweilige Form überführt werden. Dabei ist  $\mathbf{F}$  ein Vektorfeld das jedem Raumpunkt  $(x;y;z)^T$  einen Vektor  $\mathbf{F}(x;y;z)^T$  zuordnet. Wird der Gauß'sche Integralsatz auf Gl. (2.3) und Gl. (2.4) angewandt, folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \oint\oint_A \mathbf{D} d\mathbf{S} &= \iiint_V \rho dV = \iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{D}) dV \\ \oint\oint_A \mathbf{B} d\mathbf{S} &= 0 = \iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{B}) dV \end{aligned} \quad (2.12)$$

Die Integration über das Volumen ist nur dann identisch, wenn die Integranden identisch sind. Somit lautet die differenzielle Form

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Die Auswertung von Gl. (2.1) und Gl. (2.2) über den Gauß'schen Integralsatz liefert

$$\begin{aligned} \oint_C \mathbf{H} d\mathbf{l} &= \iint_A \left( \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) d\mathbf{S} = \iint_A (\nabla \times \mathbf{H}) d\mathbf{S} \\ \oint_C \mathbf{E} d\mathbf{l} &= - \frac{\partial}{\partial t} \iint_A \mathbf{B} d\mathbf{S} = \iint_A (\nabla \times \mathbf{E}) d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (2.14)$$

und der Vergleich der Integranden ergibt

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die Maxwell-Gleichungen in differentialer Form sind nur eindeutig bestimmt über die Grenzbedingungen (siehe Abschnitt 2.2) und die Materialgleichungen



$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \mu_0 \mu_r \mathbf{H} = \mu \mathbf{H} \\ \mathbf{D} &= \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E} \quad , \\ \mathbf{J} &= \kappa \mathbf{E}\end{aligned}\tag{2.16}$$

mit den Naturkonstanten (siehe Anhang A.7) für die Permeabilität  $\mu_0$ , der Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_0$  und den materialabhängigen Kenngrößen der relativen Permeabilität  $\mu_r$ , der relativen Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_r$  und der elektrischen Leitfähigkeit  $\kappa$ . Die Permeabilität und die Dielektrizitätskonstante stehen über die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum im Zusammenhang

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} .\tag{2.17}$$

Die Maxwell-Gleichungen besitzen in jedem Punkt  $(x;y;z)$  und zu jedem Zeitpunkt  $t$  Gültigkeit.



### 3 Periodische Strukturen und Kristalle

Bei der Beschreibung periodischer Vorgänge wurde bereits 1733 durch D. Bernoulli (1700-1782) versucht, eine periodische Schwingung mittels Linearkombination aus harmonischen Schwingungen, einer Grundschiwingung und Oberwellen zu beschreiben. 1807 veröffentlichte J. B. Fourier (1768-1830) auf einem Akademievortrag, dass jede periodische Temperaturverteilung durch eine harmonische Reihe dargestellt werden kann und im Jahre 1829 bewies P. L. Dirichlet (1805-1859) die Behauptung von Fourier.

Die Berechnung periodischer unendlich ausgedehnter dielektrischer Strukturen, photonische Kristalle, basiert auf den von Fourier postulierten Ergebnissen, wonach sich jede periodische Struktur in eine linear unabhängigen geometrischen Reihe, bestehend aus Sinus- und Kosinusfunktionen, zerlegen lässt. Neben der geometrischen Anordnung ermöglicht diese Beschreibung ebenso die Darstellung der Wellenfunktionen.

#### 3.1 Fourier-Analyse

Die Einführung der wichtigsten Definitionen und Begriffe der Fourier-Reihenentwicklung wird für den einfachsten Fall im  $\angle 1$  ausgeführt. Es sei eine  $2\pi$  periodische Funktion  $f(x)$  gegeben und es werden diejenigen Koeffizienten  $a_k, b_k$  der unendlichen Reihe Gl. (3.1) gesucht, so dass die trigonometrische Reihe konvergiert und die Summe der Funktion  $f(x)$  entspricht.

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)) \quad (3.1)$$

Die trigonometrische Reihe besteht aus der Konstanten nullter Ordnung  $a_0$  und  $k$  harmonischen Funktionen  $a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)$  mit den Fourier-Koeffizienten  $a_k, b_k$ . Die Integration beider Seiten der Gl. (3.1) über ein abgeschlossenes Intervall von  $-\pi+d$  bis  $\pi+d$  mit der Periode  $2\pi$ , wobei  $d$  eine beliebige reelle Zahl darstellt und das Integral über die unendliche Summe durch die Summation der Integrale ersetzt wird, liefert [23]

$$\int_{-\pi+d}^{\pi+d} f(x) dx = \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \frac{a_0}{2} dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left( \int_{-\pi+d}^{\pi+d} a_k \cos(kx) dx + \int_{-\pi+d}^{\pi+d} b_k \sin(kx) dx \right). \quad (3.2)$$

Die Integration über die Sinus- und Kosinusfunktionen ergeben Null, da die Stammfunktion aufgrund der Periodizität an den Integrationsgrenzen  $-\pi+d$  und  $\pi+d$  einen identischen Wert annehmen. Die Integrale für die Winkelfunktionen sind in Gl. (3.3) dargestellt und werden als Orthogonalitätsbeziehung des Funktionssystems bezeichnet.

$$\begin{aligned}
 \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \cos(kx) dx &= 0 & \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \sin(kx) dx &= 0 \\
 \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \sin(kx) \cos(nx) dx &= 0 \\
 \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \cos(kx) \cos(nx) dx &= \delta_{k,n} \\
 \int_{-\pi+d}^{\pi+d} \sin(kx) \sin(nx) dx &= \delta_{k,n}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Die rechte Seite der Gl. (3.2) ergibt  $\pi a_0$ , und durch Umstellen folgt die Beziehung für die Bestimmung der Konstanten nullter Ordnung.

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx \tag{3.4}$$

Die Integrationsgrenzen wurden auf das Intervall von  $-\pi$  bis  $\pi$  reduziert, da der Anfangswert keinen Einfluss auf das Integral besitzt. Für die Bestimmung der Koeffizienten  $a_k$  wird Gl. (3.1) mit  $\cos(nx)$ , wobei  $n$  eine beliebige ganze positive Zahl ist, multipliziert und über beide Seiten integriert.

$$\begin{aligned}
 \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) f(x) dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \frac{a_0}{2} dx + \dots \\
 \dots \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} a_k \cos(nx) \cos(kx) dx &+ \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} a_k \cos(nx) \sin(kx) dx
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Die auf der rechten Seite stehenden Integrale werden mit Ausnahme von  $\cos(nx)\cos(kx)$  für  $n=k$  zu Null [24]. Es folgt für  $a_k$  und in analoger Weise durch Multiplikation von Gl. (3.1) mit  $\sin(nx)$  für  $b_k$

$$\begin{aligned}
 a_k &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos(kx) dx & ; k \in [0, 1, 2, \dots) \\
 b_k &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(kx) dx & ; k \in [1, 2, 3, \dots)
 \end{aligned}
 \tag{3.6}$$

Die Betrachtungen sind nicht als streng anzusehen. Ein strenger mathematischer Beweis der harmonischen Analyse ist in [25-27] gegeben. Die Konvergenz der Fourier-Reihe und die Koeffizienten nach den Euler-Fourier-Integralen Gl. (3.2) und Gl. (3.6) ist nur unter bestimmten Randbedingungen eindeutig bestimmt. Die gegebene Funktion  $f(x)$  ist im Intervall von  $-\pi$  bis  $\pi$  stetig oder lässt sich in endlich viele monotone Teilintervalle mit endlich vielen Unstetigkeitsstellen erster Art aufteilen. An der Unstetigkeitsstelle  $x=d$  der Funktion  $f(x)$  existiert der endliche rechtseitige Grenzwert  $f(d+0)$  und endliche linksseitige Grenzwert  $f(d-0)$ , wenn  $x$  gegen  $d$  strebt. An den Intervallgrenzen strebt die Funktion  $f(x)$  rechtseitig gegen  $f(-\pi+0)$  und linksseitig gegen  $f(\pi-0)$ . Diese Bedingungen werden als gewöhnliche Dirichlet'schen-Bedingungen bezeichnet. Genügt eine Funktion im Intervall von  $-\pi$  bis  $\pi$  den Dirichlet'schen-Bedingungen, so konvergiert die Fourier-Reihe dieser Funktion, und die Koeffizienten  $a_k$ ,  $b_k$  sind eindeutig bestimmt. Die Werte der Reihe sind gleich den Werten der Funktion  $f(x)$  an allen Stetigkeitsstellen und  $(f(x+0)+f(x-0))/2$  in allen Unstetigkeitsstellen.

Bei der Beschreibung periodischer Funktionen, wie z.B. der Variation des Brechungsindex bei photonischen Kristallen, wird meist nach der Entwicklung der Fourier-Reihe über ein Intervall von  $-a/2$  bis  $a/2$  gesucht. Dabei ist  $a$  eine beliebige reelle Zahl. Mit der Substitution  $h=2\pi x/a$  folgt  $f(x)=f(ha/2\pi)=g(h)$ , wobei die Funktion  $g(h)$  wieder eine Funktion im Intervall von  $-\pi$  bis  $\pi$  darstellt. Die Entwicklung in eine Fourier-Reihe liefert

$$\begin{aligned}
 a_k &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(h) \cos(kh) dh = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f\left(\frac{a}{2\pi} h\right) \cos(kh) dh \\
 &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) \cos\left(\frac{2\pi k}{a} x\right) dx \\
 b_k &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) \sin\left(\frac{2\pi k}{a} x\right) dx \\
 a_0 &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) dx
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

Unter Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften vereinfachen sich die Integrale nach Gl. (3.7) für eine Funktion in dem Intervall von  $-a/2$  bis  $a/2$ . Ist  $f(x)$  eine gerade Funktion  $f(x)=f(-x)$  folgt

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{4}{a} \int_0^{a/2} f(x) dx \\ a_k &= \frac{4}{a} \int_0^{a/2} f(x) \cos\left(\frac{2\pi k}{a} x\right) dx \\ b_k &= 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

und für eine ungerade Funktion  $f(-x)=-f(x)$  ergibt sich

$$\begin{aligned} a_0 &= 0 \\ a_k &= 0 \\ b_k &= \frac{4}{a} \int_0^{a/2} f(x) \sin\left(\frac{2\pi k}{a} x\right) dx \end{aligned} \quad (3.9)$$

Bei realen Untersuchungen oder der Implementierung wird die Fourier-Reihe nach  $n$ -Gliedern abgebrochen. Für eine Linearkombination aus  $2n+1$  trigonometrischen Polynomen nach Gl. (3.1) folgt

$$\frac{\alpha_0}{2} + \sum_{k=1}^n (\alpha_k \cos(kx) + \beta_k \sin(kx)), \quad (3.10)$$

wobei alle  $\alpha$ ,  $\beta$  noch nicht näher bestimmten Koeffizienten entsprechen. Als Maß für die Genauigkeit wird der mittlere quadratische Fehler  $\delta$  angenommen [25].

$$\delta^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[ f(x) - \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{k=0}^n (\alpha_k \cos(kx) + \beta_k \sin(kx)) \right]^2 dx \quad (3.11)$$

Die Konstanten  $\alpha$ ,  $\beta$  werden so gewählt, dass der quadratische Fehler minimal wird. Dies stellt ein gewöhnliches Minimalproblem dar. Das Auflösen des Quadrates aus Gl. (3.11) liefert

$$\begin{aligned}
& \left[ f(x) - \frac{\alpha_0}{2} + \sum_{k=1}^n (\alpha_k \cos(kx) + \beta_k \sin(kx)) \right] = \dots \\
& = [f(x)]^2 - \alpha_0 f(x) - 2f(x) \sum_{k=1}^n (\alpha_k \cos(kx) + \beta_k \sin(kx)) + \frac{\alpha_0^2}{4} + \dots \quad (3.12) \\
& + \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 \cos^2(kx) + \beta_k^2 \sin^2(kx)) + v
\end{aligned}$$

Dabei entspricht  $v$  einer Summe, die durch die Orthogonalitätsbedingung Gl. (3.3) zu Null wird. Die Integration über die Quadrate der Sinus- und Kosinusfunktionen liefert  $\pi$ , und Gl. (3.11) wird zu [25]

$$\begin{aligned}
\delta^2 = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx - \frac{\alpha_0}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx - \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n \left( \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \alpha_k \cos(kx) dx + \dots \right. \\
& \left. + \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \beta_k \sin(kx) dx \right) + \frac{\alpha_0^2}{4} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Mit den Euler-Fourier-Integralen Gl. (3.2) und Gl. (3.6) folgt für den quadratischen Fehler

$$\delta^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx - \frac{\alpha_0 a_0}{2} - \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n (\alpha_k a_k + \beta_k b_k) + \frac{\alpha_0^2}{4} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 + \beta_k^2). \quad (3.14)$$

Durch die Subtraktion und Addition von  $\frac{\alpha_0^2}{4} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 + b_k^2)$  folgt

$$\begin{aligned}
\delta^2 = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx - \frac{\alpha_0^2}{4} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 + b_k^2) + \dots \\
& + \frac{1}{4} (\alpha_0 - a_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n [(\alpha_k - a_k)^2 + (\beta_k - b_k)^2] \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Der kleinste quadratische Fehler ist gegeben, wenn  $a_k = \alpha_k$  und  $b_k = \beta_k$  für alle  $k$  gilt, da die letzten Terme der Gl. (3.15) zu Null werden. Die beste trigonometrische Approximation mit dem geringsten quadratischen Fehler wird mit den Fourier-

Koeffizienten erreicht. Der Betrag  $\tau$  des kleinsten Fehlers ist gegeben durch die Substitution von  $\alpha$ ,  $\beta$  durch  $a$  und  $b$ .

$$2\tau^2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx - \frac{a_0^2}{2} - \sum_{k=1}^n (\alpha_k^2 + b_k^2) \quad (3.16)$$

Mit zunehmender Anzahl  $n$  wird die Fourier-Reihe genauer. Dies bedeutet, wenn  $n$  gegen unendlich strebt der Fehler gegen null tangiert und die Ungleichung Gl (3.17) mit dem Gleichheitszeichen erfüllt ist.

$$\frac{a_0^2}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (\alpha_k^2 + b_k^2) \leq \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx \quad (3.17)$$

Die Fourier-Reihe ist erweiterbar auf die komplexen Zahlen. Die Summe läuft über jeden ganzzahligen Wert und für eine beliebige periodische komplexe Funktion  $f(x)$  im Intervall von  $-a/2$  bis  $a/2$  folgt

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{j \frac{2\pi k x}{a}}. \quad (3.18)$$

Die komplexen Koeffizienten  $c_k$  sind bestimmt durch [24]

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) dx \\ c_k &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) e^{-j \frac{2\pi k x}{a}} dx \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Erweiterung der Fourier-Transformation in den  $\angle^2$  erfolgt analog. Für eine beliebige komplexe Funktion  $f(x,z)$  mit der Periode  $2a$  in  $x$  und  $2b$  in  $y$  ergeben sich die Fourier-Koeffizienten zu



$$f(x, y) = \sum_{u=-\infty}^{\infty} \sum_{v=-\infty}^{\infty} c(u, v) e^{j2\pi \left( \frac{ux}{a} + \frac{vy}{b} \right)}$$

$$F(u, v) = \frac{1}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} f(x, y) e^{-j2\pi \left( \frac{ux}{a} + \frac{vy}{b} \right)} dx dy \quad (3.20)$$

Die Fourier-Transformation im  $\angle^2$  wird anhand des quadratischen Gitters gezeigt (siehe Abb. 3.1). Jede weitere periodische Struktur ist in ähnlicher Weise herzuleiten und die Resultate sind im Anhang A.1 dargestellt.

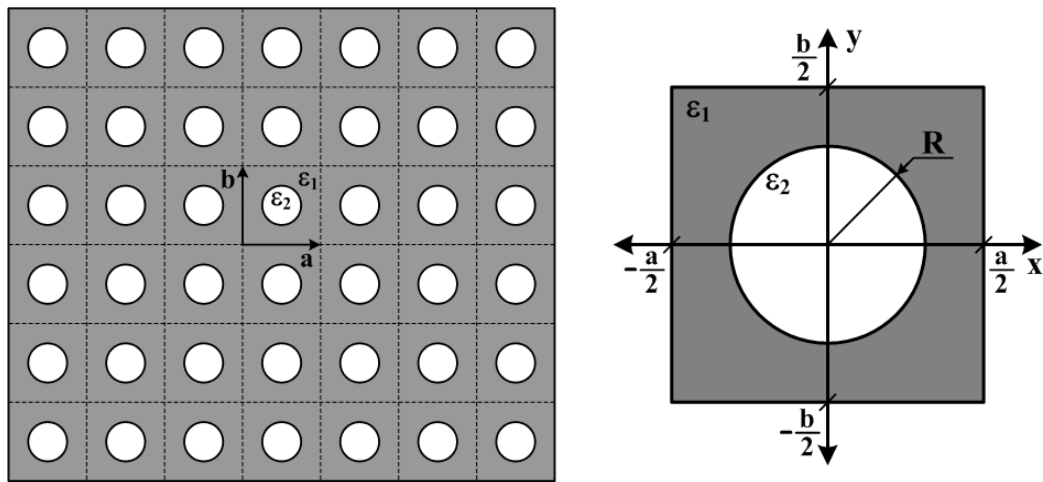


Abb. 3.1: *Links:* Schematische Darstellung eines periodischen quadratischen Gitters bestehend aus Zylindern mit dem Material  $\varepsilon_2$  umgeben vom Material mit  $\varepsilon_1$ . *Rechts:* Grundzelle des quadratischen Gitters mit der periodischen Funktion  $f(x,y)$  und der Periodizität von  $a$  in  $x$  und  $b$  in  $y$  Richtung ist überlagert von der periodischen Zylinderfunktion  $C(x,y)$  mit einem Radius  $R$ .

Die periodische quadratische Funktion  $f(x,y)$  wird durch die Basiszelle im Intervall  $-a/2$  bis  $a/2$  in  $x$  und  $-b/2$  bis  $b/2$  in  $y$  dargestellt. Sie besteht aus einem Material  $\varepsilon_1$  überlagert von einem Zylinder  $C(x,y)$  mit dem Material  $\varepsilon_2$ . Die allgemeine Funktion lautet:

$$f(x, y) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) C(x, y)$$

$$C(x, y) = \begin{cases} 1 & , \sqrt{x^2 + y^2} \leq R \\ 0 & , \sqrt{x^2 + y^2} > R \end{cases} \quad (3.21)$$

Eingesetzt in das Euler-Fourier-Integral Gl. (3.20) ergibt sich für die Fourier-Koeffizienten

$$\begin{aligned}
F(u, v) &= \frac{1}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) C(x, y) e^{-j2\pi \left( \frac{ux}{a} + \frac{vy}{b} \right)} dx dy \\
&= \varepsilon_1 \delta_{u=0, v=0} + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} C(x, y) e^{-j2\pi \left( \frac{ux}{a} + \frac{vy}{b} \right)} dx dy
\end{aligned} \quad (3.22)$$

Das Integral über den ersten Summanden, der Konstanten  $\varepsilon_1$ , ergibt einen Dirac-Impuls im Ursprung des Fourier-Raums (siehe Anhang A.6). Für den zweiten Summanden wird eine Fallunterscheidung, mit  $u, v$  gleich Null und  $u, v$  ungleich Null, durchgeführt. Die Integration wird vereinfacht mittels Koordinatentransformation in Zylinderkoordinaten.

$$\begin{aligned}
x &= r \sin(\phi) & u &= v \sin(\alpha) \\
y &= r \cos(\phi) & v &= v \cos(\alpha) \\
r &= \sqrt{x^2 + y^2} & v &= \sqrt{u^2 + v^2}
\end{aligned} \quad (3.23)$$

Die Transformation des zweiten Summanden Gl. (3.22) und Integration für  $F(0,0)$  liefert

$$\begin{aligned}
F(0,0) &= \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) C(x, y) dx dy \\
&= \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{ab} \int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\phi \\
&= \frac{\pi R^2}{ab} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)
\end{aligned} \quad (3.24)$$

Für den Fall, dass  $u$  oder  $v$  ungleich Null ist, folgt nach der Transformation in Zylinderkoordinaten und dem Additionstheorem  $\cos(\phi - \alpha) = \cos(\phi)\cos(\alpha) - \sin(\phi)\sin(\alpha)$  [28]

$$\begin{aligned}
F(u, v) &= \frac{1}{ab} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_0^{2\pi} \int_0^R e^{-j2\pi (rv \sin(\phi) \sin(\alpha) + rv \cos(\phi) \cos(\alpha))} r dr d\phi \\
&= \frac{1}{ab} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_0^{2\pi} \int_0^R e^{-j2\pi rv \cos(\phi - \alpha)} r dr d\phi
\end{aligned} \quad (3.25)$$

Mit der Substitution  $g=\phi-\alpha$ ,  $df=dg$  und dem Integral von 0 bis  $2\pi$ , welches der Bessel-Funktion nullter Ordnung  $J_0$  entspricht,  $\int_{\alpha}^{2\pi+\alpha} e^{-2\pi j v r \cos(g)} dg = 2\pi J_0(2\pi v r)$ , folgt

$$F(u, v) = \frac{2\pi}{ab} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_0^R J_0(2\pi v r) r dr, \quad (3.26)$$

wobei  $J_0(-2\pi v r) = J_0(2\pi v r)$  ist. Mit der weiteren Substitution  $c=2\pi v r$ ,  $dc=2\pi v dr$  und dem Integral für die Bessel-Funktion  $\frac{1}{R} \int_0^R J_0(c) c dc = J_1(R)$  resultiert

$$\begin{aligned} F(u, v) &= \frac{2\pi R}{ab} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{1}{2\pi R v} \int_0^{vR} J_0(c) c dc \\ &= \frac{R}{abv} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) J_1(2\pi v R) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Durch die Einführung eines Füllfaktors  $f_Q$ , der das Verhältnis von Zylinderfläche zur Gesamtfläche der Basiszelle angibt, und eines Vektors  $\mathbf{k}=(u,v)^T$  ergibt sich die vollständige Fourier-Transformation einer rechteckigen Basiszelle überlagert mit einem Zylinder zu

$$\begin{aligned} f_Q &= \frac{A_{\text{Zyl}}}{A_{\text{Zelle}}} = \frac{\pi R^2}{ab} \\ F(\mathbf{k}) &= \begin{cases} \varepsilon_1 + f_Q (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) & ; \mathbf{k} = \mathbf{0} \\ 2f_Q (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(2\pi |\mathbf{k}| R)}{2\pi |\mathbf{k}| R} & ; \mathbf{k} \neq \mathbf{0} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Nach der Transformation in die reziproken Gittervektoren stellt sich die Gl. (3.28) ohne  $2\pi$  wie folgt dar [29-33].

### 3.2 Kristallgitter und Bragg-Bedingung

Die Anfänge der Kristallographie gehen auf N. Steno (1636-1686) zurück. Er erkannte bei Untersuchungen am Quarz, dass die Oberflächen im konstanten Winkel zueinander stehen und entwickelte das Gesetz der konstanten Winkel. R.-J. Haüy (1743-1822) fand bei Experimenten, wobei er Kalkspat durch den Fall auf den Boden zerbrechen ließ, dass Kalkspat aus kleineren, immer gleich aufgebauten Einheiten bestehen muss, da alle Bruchstücke und der Ausgangskristall die gleiche (ähnliche) Geometrie aufweisen. Diese Entdeckung führte zu der Indizierung der Kristalle, welche durch W. H. Miller (1801-1880) 1839 vorgeschlagen wurden. Die ganzzahligen Indizes beschreiben das Verhältnis der reziproken Achsenabschnitte. A. Bravais (1811-1863) zeigte 1849, dass es 14 mögliche Elementarzellen im dreidimensionalen Raum gibt. Diese Elementarzellen stellen die einfachsten, sich im Kristall periodisch wiederholenden Zellen dar. Eine Einordnung aller unterschiedlichen Kristalle in 230 Gruppen gelang A. M. Schönflies (1853-1928) und J. S. Fjodorow (1853-1919) zeitgleich 1891. Ein entscheidender Durchbruch bei der Analyse von einigen Kristallstrukturen und der Bestimmung der Wellenlänge von Röntgenstrahlen gelang 1913 W. H. Bragg (1862-1942) zusammen mit seinem Sohn W. L. Bragg (1890-1971) mit der Drehkristallmethode. Sie erhielten “for their services in the analysis of crystal structure by means of X-rays” 1915 den Nobelpreis für Physik [34].

Kristallgitter sind periodische Strukturen, wobei die kleinste Struktureinheit die Basiszelle darstellt. Eine schematische Darstellung von 1D-, 2D- und 3D Kristallausschnitten ist in Abb. 2.1 gezeigt. Die Basiszelle beschreibt das grundlegende physikalische Verhalten des gesamten Kristalls und wird durch die Basisvektoren  $\mathbf{a}_{1,2,3}$  aufgespannt.

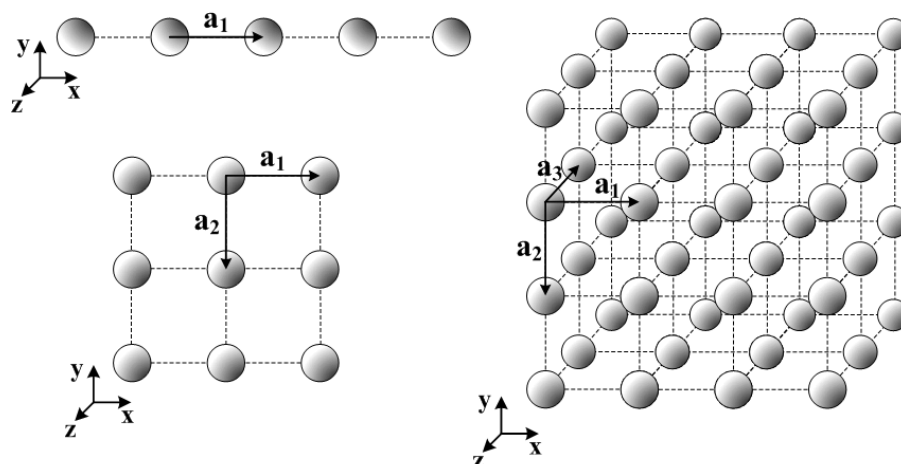


Abb. 3.2: Schematische Darstellung von Kristallgittern mit den Gittervektoren  $\mathbf{a}_{1,2,3}$ . Links oben: 1D Kristall Links unten: 2D Kristall Rechts: 3D Kristall

Ausgehend von einem beliebigen Punkt im Kristall geht die Basiszelle durch eine Translation wieder in sich selbst über  $n(\mathbf{r})=n(\mathbf{r}+\mathbf{T})$ , mit dem Translationsvektor  $\mathbf{T}$  nach Gl. (3.29) für ein kartesisches Koordinatensystem mit dem Ortsvektor  $\mathbf{r}=(x;y;z)^T$ .

$$\mathbf{T} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 \quad m_{1,2,3} \in \mathbb{Z} \quad (3.29)$$

Die ganzzahligen Vielfachen  $m_{1,2,3}$  durchlaufen für einen unendlich ausgedehnten Kristall den gesamten Wertebereich  $\mathbb{R}^3$  und bilden die Basiszelle periodisch von minus unendlich bis plus unendlich ab. Die Wahl der Basiszelle ist zu einem gewissen Grade willkürlich. Auch größere Zellen, die mittels einer Linearkombination der Gittervektoren invariant bleiben, können gewählt werden. Diese Eigenschaft wird bei der Berechnung von Defekten in einem periodischen Kristall ausgenutzt (siehe Abschnitt 4.2.3). Die Translationsbedingung des realen Gitters fordert die Gültigkeit von

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) &= n(\mathbf{r}) && ; \text{im } \mathbb{R}^3 \\ n(x + a) &= n(x) && ; \text{im } \mathbb{R}^1 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Wie im vorhergehenden Abschnitt 3.1 beschrieben können periodische Funktionen  $f(\mathbf{r})$  als Fourier-Reihe  $F(\mathbf{G})$  dargestellt werden. Es sei  $f(x)$  eine mit den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1=a$  im  $\mathbb{R}^1$  periodische Funktion (siehe Abb. 3.2 *Links oben*) welche durch die trigonometrische Reihe

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{j2\pi \frac{kx}{a}} = \sum_{b=-\infty}^{\infty} c_b e^{jgx} \quad (3.31)$$

darstellbar ist, mit  $k$  einer ganzen Zahl und der Substitution  $b=2\pi u/a$ . Die Bedingung der Invarianz Gl. (3.30) liefert für Gl. (3.31), dass  $\exp(jga)=1$  erfüllt sein muss, und somit das Produkt aus  $g$  und  $a$  ein Vielfaches von  $2\pi$  ist. Für  $g=2\pi u/a$ , mit  $u$  Element aus  $\mathbb{R}^1$  bei  $x=a$  folgt das  $b=2\pi/a$  ist. Der Gittervektor  $b$  ist das  $2\pi$  fache des reziproken Gitterabstandes  $a$  im realen Gitter. A. Sommerfeld (1868-1951) schreibt über die Begriffsgebung: „Edwald verdankt man auch den furchtbaren Begriff des reziproken Gitters“ [35]. Allgemein steht das reziproke Gitter im Fourier-Raum mit den Vektoren  $\mathbf{b}_{1,2,3}$  im direkten Verhältnis zu den Gittervektoren  $\mathbf{a}_{1,2,3}$  des realen Gitters mit [36-38]

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j &= \delta_{i,j} \\
\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V_{\text{Zelle}}} & \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V_{\text{Zelle}}} & \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V_{\text{Zelle}}} \\
\text{mit } V_{\text{Zelle}} &= \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Die Vektoren  $\mathbf{b}_{1,2,3}$  werden reziproke Gittervektoren genannt und beschreiben die realen Gitter im Fourier-Raum. Jeder Gitterpunkt im reziproken Gitter ist ebenso invariant. Der Translationsvektor  $\mathbf{G}$  des reziproken Gitters im  $\mathbb{R}^3$  lautet allgemein

$$\mathbf{G} = l_1 \mathbf{b}_1 + l_2 \mathbf{b}_2 + l_3 \mathbf{b}_3 \quad l_{1,2,3} \in \mathbb{Z}. \tag{3.33}$$

Die reziproken Gittervektoren sind diejenigen Vektoren unter der eine Funktion  $f(\mathbf{r})=f(\mathbf{r}+\mathbf{T})$  bei Translation um  $\mathbf{T}$  die gleichen Fourier-Koeffizienten  $c_k$  ergeben. Allgemein können die Koeffizienten und das Integral der Fourier-Transformation im  $\mathbb{R}^3$  mit dem Volumen  $V_{\text{Zelle}}$  der Zelle geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) &= \sum_{\xi} c(\mathbf{G}_{\xi}) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{T})} = \sum_{\xi} c(\mathbf{G}_{\xi}) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{T}} \\
&= \sum_{\xi} c(\mathbf{G}_{\xi}) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} = f(\mathbf{r}) \\
c(\mathbf{G}_{\xi}) &= \frac{1}{V_{\text{Zelle}}} \int_{\text{Zelle}} f(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Das reziproke Gitter stellt eine Schar von Gitterebenen im Fourier-Raum dar. Eine

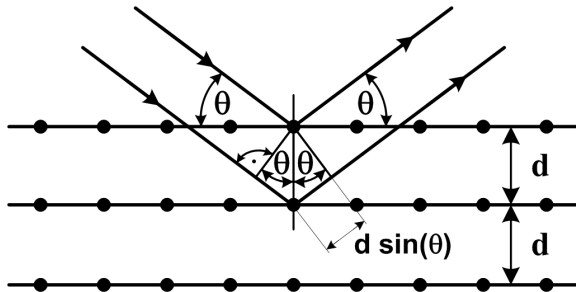


Abb. 3.3: Reflexion einer ebenen Welle mit der Wellenlänge  $\lambda$  an parallelen Netzebenen im Abstand  $d$ . Die Phasendifferenz zwischen zwei Strahlen beträgt  $2\pi l$ . Die Bragg-Bedingung ist erfüllt, wenn  $2d\sin(\theta)=l\lambda$  ist.

Welle, die in einen Kristall eingestrahlt wird, wird an den Gitterebenen zu einem Teil gebeugt, und bei elastischer Streuung ergibt sich analog zum Reflexionsgesetz (siehe Abschnitt 4), dass der Einfallswinkel  $\theta$  gleich dem Reflexionswinkel ist. Der Phasenwinkelunterschied zweier Strahlen, die auf benachbarte Gitterebenen treffen, ist  $d\sin(\theta)$ . Eine konstruktive

Interferenz der gebeugten Wellen entsteht bei einem Wegunterschied von einem ganzzahligen Vielfachen  $l$  der Wellenlänge  $\lambda$ . Es ergibt sich die Bragg-Bedingung unter der eine Bragg-Reflektion auftritt

$$2d \sin(\theta) = l\lambda, \quad l \in \mathbb{N}. \quad (3.35)$$

Jede Gitterebene reflektiert nur einen Teil  $10^{-3}$ - $10^{-5}$  der einfallenden Strahlung, so dass  $10^3$ - $10^5$  Gitterebenen zur Entstehung des reflektierten Strahls in einem perfekten Kristall nötig sind [36]. Die Bragg-Bedingung folgt aus dem periodischen Aufbau des Raumgitters. Eine weitere Darstellung der Beugung an Kristallgittern wurde durch L. Brillouin (1869-1959) angegeben [39]. Die geometrische Konstruktion der Brillouin-Zone erfolgt, indem von einem beliebigen, aber festen reziproken Gitterpunkt die Verbindungslinien zu allen anderen reziproken Raumpunkten gezogen werden (siehe Abb. 3.4). Die Konstruktion der Mittelsenkrechten dieser Verbindungslinien ergeben Flächenelemente im  $\mathbb{R}^2$  und Volumenelemente im  $\mathbb{R}^3$ . Die aus der Konstruktion resultierende minimale Fläche entspricht der 1. Brillouin Zone.

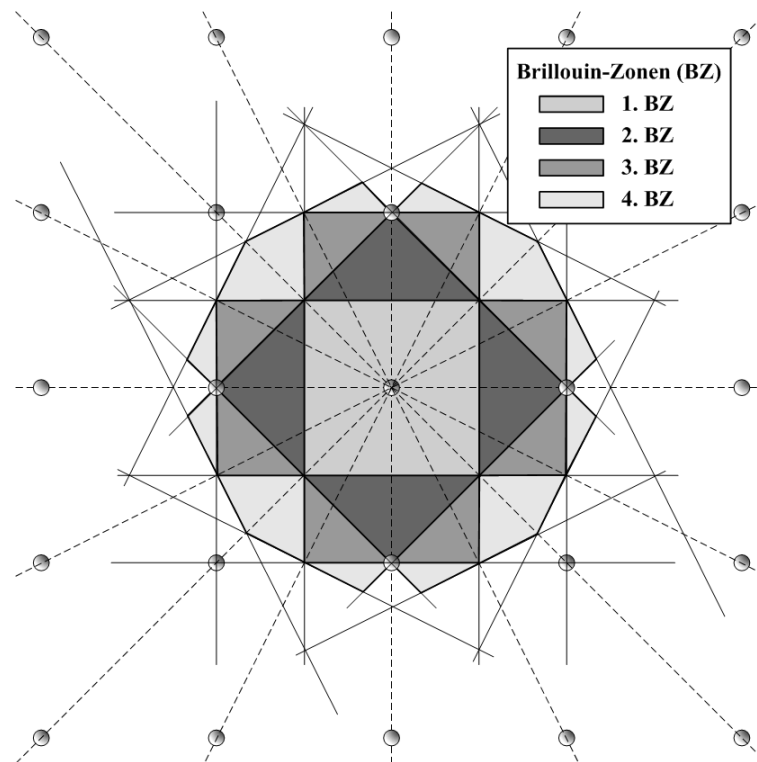


Abb. 3.4: Geometrische Herleitung und Darstellung der ersten vier Brillouin-Zonen eines quadratischen Gitters. Die gestrichelten Linien entsprechen den Verbindungslinien der reziproken Raumpunkterpunkte. Die dünnen Linien sind die Mittelsenkrechten der Verbindungslinien. Das Quadrat im Zentrum entspricht der 1. Brillouin-Zone.





## 4 Wellenausbreitung in periodischen Strukturen

„In den letzten Jahren hat man in mannigfacher Weise versucht, optische, elektrische und thermische Eigenschaften fester Körper mit elastischen „Eigenschwingungen“ des molekularen Raumgitters in Zusammenhang zu bringen. ... So erscheint es vielleicht als lohnend, die Frage allgemein zu untersuchen, welche Schwingungsvorgänge in einem festen Körper von molekularer Struktur, d.h. einem Raumgitter, vor sich gehen können“ [40] (1928). Die allgemeine Lösung des Differenzialgleichungssystems für eine unendlich ausgedehnte periodische Struktur und die Frage nach den Eigenwerten und Eigenlösungen hängt maßgeblich von den Randbedingungen ab. Die physikalische Deutung der Lösung dagegen wird durch die Aufgabenstellung gegeben für z.B. die Schwingung eines Feder-Masse-Systems, die Theorie der spezifischen Wärme, die Bewegung eines freien Elektrons in einem Kristallgitter oder die Ausbreitung von Licht in einem periodischen Kristallgitter. Grundlegende Untersuchungen dieser Vorgänge für thermische und optische Phänomene wurden von M. Born (1882-1970) und Th. v. Karman (1881-1963) durchgeführt [40, 41]. Eine exakte theoretische mathematische Beschreibung der Integralgleichungen entstand um 1900 durch D. Hilbert (1862-1943) [42] und wurde auf physikalische Anwendungen, vor allen der quantenmechanischen Fragen jener Zeit, durch M. Born, W. Heisenberg (1901-1976), P. Jordan (1902-1980), A. Einstein (1879-1955) und A. Wintner (1903-1958), angewandt [43-46]. Eine allgemeine Lösung der Beugung von Wellen über gruppentheoretische Betrachtungen in einem Kristallgitter wurde erstmals durch E. E. Witmer und L. Rosenfeld gefunden [47]. Heute wird die Lösung allgemein in Bloch-Wellen angegeben. F. Bloch (1905-1983) leitete an dem Beispiel des elektrostatischen Potentials der Schrödinger-Gleichung die allgemeinen Bedingungen der Lösung für periodische Vorgänge her. Er formulierte den wichtigen Satz: „Die Tatsache, daß sich von den Eigenfunktionen nach ... stets ein Faktor

$$\psi_{l,m,n} = e^{j2\pi\left(\frac{lx}{L} + \frac{my}{M} + \frac{nz}{N}\right)} \quad (4.1)$$

abspalten läßt, wobei der Rest nur noch die Periodizität des Gitters aufweist, lässt sich anschaulich so formulieren, daß wir es mit ebenen de Broglie - Wellen zu tun haben, die im Rhythmus des Gitteraufbaus moduliert sind“ [48]. Die Beschreibung bei der Ausbreitung von Wellen in einem periodischen System werden für das Kapitel grundlegende Vereinbarungen getroffen. Das System wird als verlustfrei, quellenfrei, isotrop und rein dielektrisch angenommen. Somit reduzieren sich die Maxwell-Gleichungen (siehe Abschnitt 2.3) zu

$$\begin{aligned}
\nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\
\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Unter der Annahme einer harmonischen Zeitabhängigkeit mit  $e^{-j\omega t}$ , wobei sich nach Fourier jede Lösung durch Überlagerung von harmonischen Wellen aufbauen lässt, ergibt für die Feldfunktionen

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-j\omega t} \\
\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-j\omega t}
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Das Einsetzen der Gl. (4.3) in die Maxwell-Gleichungen Gl. (4.2) und die Ableitung nach der Zeit  $t$  liefert

$$\begin{aligned}
\nabla \times \mathbf{H} &= -j\omega \mathbf{D} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\
\nabla \times \mathbf{E} &= j\omega \mathbf{B} & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Die Gleichungen geben die Transversalität der elektromagnetischen Wellen an. Für eine beliebige ebene Welle folgt aus der Divergenz gleich Null, dass das elektrische  $\mathbf{E}$  und das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  senkrecht auf dem Wellenvektor stehen.

## 4.1 2x2-Matrix-Methode

Die Ausbreitung ebener Wellen in eindimensionalen (1D) periodischen Systemen basieren auf den Überlegungen von M. Born und P. Yeh [49, 50]. Dabei werden ausgehend von einfachen Systemen, wie der Reflektion und Brechung an einer Schicht bis zur Berechnung unendlich periodischer Strukturen, grundlegende physikalische Eigenschaften aufgezeigt und weiterführend auf 1D omnidirektionale Kristalle angewandt.

### 4.1.1 Reflexion und Transmission an einer Grenzschicht

Ein grundlegender Sachverhalt bei der Berechnung periodischer optischer Strukturen ist das Verhalten von elektromagnetischen Wellen an einer Grenzfläche zwischen zwei Medien. Eine ebene monochromatische Welle fällt unter einem Winkel  $\phi_i$  mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}_i$ , aus dem Medium eins mit dem Brechungsindex  $n_1$  kommend, auf eine Grenzschicht. Diese wird zu einem Teil gebrochen und geht mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}_g$  (gebeugten) unter einem Winkel  $\phi_g$  in das zweite Medium mit einem Brechungsindex  $n_2$  über. Ein weiterer Teil der einfallenden Welle wird an der Grenzschicht in das Medium eins reflektiert mit dem Reflexionswinkel  $\phi_r$  und dem Wellenvektor  $\mathbf{k}_r$ . Dieser Sachverhalt ist in Abb. 4.1 schematisch dargestellt. Der normale Vektor  $\mathbf{n}$  steht senkrecht auf der Grenzfläche und zeigt vom Medium eins in das zweite Medium (siehe Abschnitt 2.2). Die Wellen in komplexer Form lauten [20]

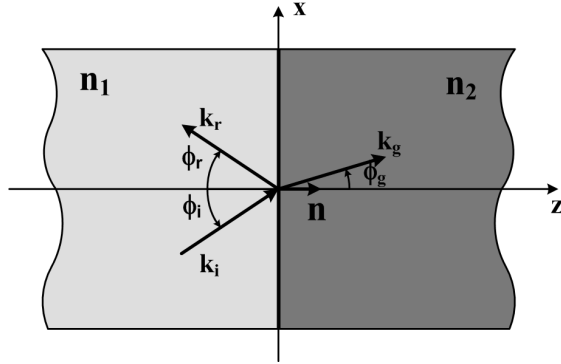


Abb. 4.1: Schematische Darstellung zweier unendlich ausgedehnter Medien mit den Brechungsindizes  $n_1$  und  $n_2$ . Die einfallende Welle mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}_i$  spaltet sich in eine reflektierte-  $\mathbf{k}_r$  und gebeugte Welle  $\mathbf{k}_g$  auf.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}^i &= \mathbf{E}_0^i e^{j\mathbf{k}^i \cdot \mathbf{r}} & \mathbf{B}^i &= \sqrt{\mu_1 \epsilon_1} \frac{\mathbf{k}^i \times \mathbf{E}^i}{|\mathbf{k}^i|} \\
 \mathbf{E}^g &= \mathbf{E}_0^g e^{j\mathbf{k}^g \cdot \mathbf{r}} & \mathbf{B}^g &= \sqrt{\mu_1 \epsilon_1} \frac{\mathbf{k}^g \times \mathbf{E}^g}{|\mathbf{k}^g|} \\
 \mathbf{E}^r &= \mathbf{E}_0^r e^{j\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}} & \mathbf{B}^r &= \sqrt{\mu_1 \epsilon_1} \frac{\mathbf{k}^r \times \mathbf{E}^r}{|\mathbf{k}^r|}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Die Grenzbedingungen der Maxwell-Gleichungen (siehe Abschnitt 2.2) müssen zu jedem Zeitpunkt und in jedem Punkt der Ebene  $z=0$  erfüllt sein. Dies bedeutet, dass die zeitliche und räumliche Änderung der Felder an der Grenzschicht äquivalent ist und somit die Phasenfaktoren der drei Wellen, unabhängig von der Art der Grenzbedingung, miteinander übereinstimmen müssen. Für einen beliebigen aber festen Punkt an der Grenzfläche ( $z=0$ ) folgt

$$\mathbf{k}^i \cdot \mathbf{r} = \mathbf{k}^g \cdot \mathbf{r} = \mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}. \quad (4.6)$$

Die Felder können nach Abb. 4.1 in Komponenten entlang der Koordinatenachsen in einem Punkt  $\mathbf{r}=(x,y,0)^T$  mit dem Betrag des Wellenvektors  $k_0$  zerlegt werden.

$$\begin{aligned} k_x^i &= k_0^i \sin(\phi_i) & k_y^i &= 0 & k_z^i &= k_0^i \cos(\phi_i) \\ k_x^g &= k_0^g \sin(\phi_g) & k_y^g &= 0 & k_z^g &= k_0^g \cos(\phi_g) \\ k_x^r &= k_0^r \sin(\phi_r) & k_y^r &= 0 & k_z^r &= k_0^r \cos(\phi_r) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Die Normalkomponente des Wellenvektors zeigt in z-Richtung und die Tangentialkomponente in x-Richtung.

$$k_0^i \sin(\phi_i) = k_0^g \sin(\phi_g) = k_0^r \sin(\phi_r) \quad (4.8)$$

Der Betrag des Wellenvektors  $k_0 = \omega\sqrt{\mu\epsilon}$  ist abhängig vom Medium, in dem sich die Welle ausbreitet, und der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ . Die reflektierte und eingestrahlte Welle breitet sich im selben Medium aus  $k_0^i=k_0^r$  und es folgt unmittelbar das Reflexionsgesetz mit

$$\sin(\phi_i) = \sin(\phi_r). \quad (4.9)$$

Für die gebrochene Welle ergibt sich das Snellius'sche Brechungsgesetz

$$\frac{\sin(\phi_g)}{\sin(\phi_i)} = \frac{k_x^i}{k_x^g} = \sqrt{\frac{\mu_1 \epsilon_1}{\mu_2 \epsilon_2}} = \frac{n_1}{n_2}. \quad (4.10)$$

Diese Beziehung beschreibt die Winkeländerung bei dem Übergang einer Welle in ein zweites Medium. Ist das Medium eins optisch dünner ( $n_1 < n_2$ ) wird die Welle zum Lot hin gebrochen. Für den Übergang aus einem optisch dichteren Medium ( $n_1 > n_2$ ) folgt ein Grenzwinkel ab dem es zur Totalreflektion kommt [22, 49]. Die gesamte Energie wird in das Medium eins reflektiert.

Die Gl. (4.10) gibt keine Auskunft über die Amplituden der reflektierten und gebrochenen Wellen. Aus Gl. (4.5) für die transversalen und normalen

Feldkomponenten der eingestrahnten und reflektierten Wellen folgt für das elektrische und magnetische Feld

$$\begin{aligned}
 E_x^{i,r} &= -E_{n0}^{i,r} \cos(\phi_{i,r}) e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}} & H_x^{i,r} &= -E_{t0}^{i,r} n_1 \cos(\phi_{i,r}) e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}} \\
 E_y^{i,r} &= E_{t0}^{i,r} e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}} & H_y^{i,r} &= -E_{n0}^{i,r} n_1 e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}} \\
 E_z^{i,r} &= E_{n0}^{i,r} \sin(\phi_{i,r}) e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}} & H_z^{i,r} &= E_{t0}^{i,r} n_1 \sin(\phi_{i,r}) e^{jk^{i,r} \cdot \mathbf{r}}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

und die Felder der gebrochenen Welle zu

$$\begin{aligned}
 E_x^g &= -E_{n0}^g \cos(\phi_g) e^{jk^g \cdot \mathbf{r}} & H_x^g &= -E_{t0}^g n_2 \cos(\phi_g) e^{jk^g \cdot \mathbf{r}} \\
 E_y^g &= E_{t0}^g e^{jk^g \cdot \mathbf{r}} & H_y^g &= -E_{n0}^g n_2 e^{jk^g \cdot \mathbf{r}} \\
 E_z^g &= E_{n0}^g \sin(\phi_g) e^{jk^g \cdot \mathbf{r}} & H_z^g &= E_{t0}^g n_2 \sin(\phi_g) e^{jk^g \cdot \mathbf{r}}
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Die Tangentialkomponenten gehen stetig an einer Grenzfläche ineinander über. Dabei besitzt die Grenzfläche keine Flächenladung und die Grenzbedingung lautet

$$\begin{aligned}
 E_x^i + E_x^r &= E_x^g & E_y^i + E_y^r &= E_y^g \\
 H_x^i + H_x^r &= H_x^g & H_y^i + H_y^r &= H_y^g
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Durch das Einsetzen der Gl. (4.11), Gl. (4.12) in Gl. (4.13) folgt in Abhängigkeit der elektrischen Feldkomponenten

$$\begin{aligned}
 \cos(\phi_i) (E_{n0}^i - E_{n0}^r) &= E_{n0}^g \cos(\phi_g) \\
 E_{t0}^i + E_{t0}^r &= E_{t0}^g \\
 n_1 \cos(\phi_i) (E_{t0}^i - E_{t0}^r) &= E_{t0}^g n_2 \cos(\phi_g) \\
 n_1 (E_{n0}^i + E_{n0}^r) &= n_2 E_{n0}^g
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Die in Gl. (4.14) dargestellten Beziehungen zeigen eine Abhängigkeit des elektromagnetischen Feldes zum einen aus nur transversalen Komponenten oder aus nur normalen Komponenten. Es ist zweckmäßig die beiden Fälle getrennt zu untersuchen,

wobei eine Linearkombination beider den allgemeinen Fall einer elliptischen Polarisation hervorruft. Für eine TE (transversal elektrische) Polarisation, wobei der Wellenvektor transversal zur Grenzfläche schwingt, folgt für die Grenzbedingungen

$$\begin{aligned} E_{t0}^i + E_{t0}^r &= E_{t0}^g \\ n_1 \cos(\phi_i) (E_{t0}^i - E_{t0}^r) &= E_{t0}^g n_2 \cos(\phi_g) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Eine Lichtwelle, die vom Medium eins in das Medium zwei übergeht, folgt für die Transmission  $t_{TE}$  und Reflexion  $r_{TE}$  unter Berücksichtigung, dass nur die gebeugte Welle im zweiten Medium existiert

$$\begin{aligned} r_{TE} &= \frac{E_{t0}^r}{E_{t0}^i} = \frac{n_1 \cos(\phi_i) - n_2 \cos(\phi_g)}{n_1 \cos(\phi_i) + n_2 \cos(\phi_g)} \\ t_{TE} &= \frac{E_{t0}^g}{E_{t0}^i} = \frac{2n_1 \cos(\phi_i)}{n_1 \cos(\phi_i) + n_2 \cos(\phi_g)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Der zweite Fall, einer TM (transversalen magnetischen) Polarisation, schwingt der magnetische Wellenvektor transversal und das elektrische Feld normal zur Grenzfläche, da nach der Divergenz von  $\mathbf{H}$  und  $\mathbf{E}$  gleich Null die Wellenvektoren beider ebenen Wellen senkrecht zueinander stehen, folgt aus Gl. (4.14) für die Amplituden der Normalkomponenten des elektrischen Feldes oder TM-Polarisation die Grenzbedingungen

$$\begin{aligned} \cos(\phi_i) (E_{n0}^i - E_{n0}^r) &= E_{n0}^g \cos(\phi_g) \\ n_1 (E_{n0}^i + E_{n0}^r) &= n_2 E_{n0}^g \end{aligned} \quad (4.17)$$

und die Koeffizienten für die Reflexion  $r_{TM}$  und Transmission  $t_{TM}$  zu

$$\begin{aligned} r_{TM} &= \frac{E_{n0}^r}{E_{n0}^i} = \frac{n_2 \cos(\phi_i) - n_1 \cos(\phi_g)}{n_1 \cos(\phi_g) + n_2 \cos(\phi_i)} \\ t_{TM} &= \frac{E_{n0}^g}{E_{n0}^i} = \frac{2n_1 \cos(\phi_i)}{n_1 \cos(\phi_g) + n_2 \cos(\phi_i)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Die Gl. (4.16) und Gl. (4.18) sind die bekannten Fresnel-Formeln. Sie geben den Zusammenhang zwischen den Amplituden der reflektierten und transmittierten zu der eingestrahlten Welle an.

Für die weiteren Betrachtungen ist es zweckmäßig, die Grenzbedingung zu erweitern.

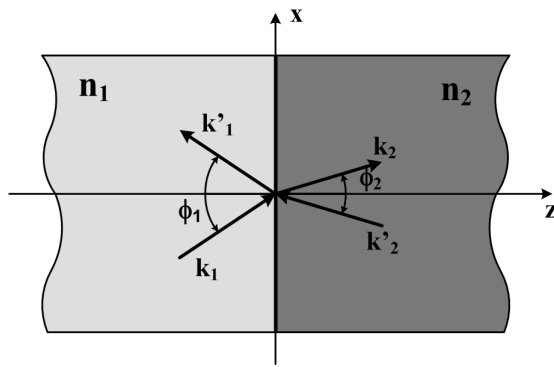


Abb. 4.2: Reflexion und Transmission an einer Grenzschicht unter der Annahme einer reflektierten Welle im Medium zwei.

Eine transversale Welle mit den Feldkomponenten  $E_1$ ,  $H_1$  fällt auf eine Grenzfläche und wird gebrochen ( $E_2$ ,  $H_2$ ), und ein Teil reflektiert in das erste Medium mit  $E'_1$ ,  $H'_1$  zurück. Zusätzlich wird eine weitere Welle im Medium zwei mit  $E'_2$ ,  $H'_2$  angenommen. Die transversalen Komponenten des magnetischen und elektrischen Feldes gehen stetig an der Grenzschicht vom Medium eins in das zweite Medium über. Es wird in TE- und TM-Wellen unterschieden. Für eine TE-polarisierte

Welle ergibt sich die erweiterte Grenzbedingung des Reflektionsgesetzes Gl. (4.9) und mit  $\phi_i = \phi_r = \phi_1$ ,  $\phi_t = \phi_2$  folgt

$$\begin{aligned} E_1 + E'_1 &= E_2 + E'_2 \\ n_1 \cos(\phi_1)(E_1 - E'_1) &= n_2 \cos(\phi_2)(E_2 - E'_2) \end{aligned} \quad (4.19)$$

In eine Matrixschreibweise umgeformt ergibt sich

$$\mathbf{D}_{\text{TE}}(1) \begin{pmatrix} E_1 \\ E'_1 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_{\text{TE}}(2) \begin{pmatrix} E_2 \\ E'_2 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

mit

$$\mathbf{D}_{\text{TE}}(i) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_i \cos(\phi_i) & -n_i \cos(\phi_i) \end{pmatrix}, i = 1, 2. \quad (4.21)$$

Die Matrix  $\mathbf{D}_{\text{TE}}$  ist die dynamische Matrix der TE-Polarisation an einer Grenzschicht. In analoger Weise folgt für die Erweiterung der Grenzbedingung Gl. (4.14)

$$\begin{aligned} \cos(\phi_1)(E_1 + E'_1) &= E_{n_0}^g \cos(\phi_2)(E_2 + E'_2) \\ n_1(E_1 - E'_1) &= n_2(E_2 - E'_2) \end{aligned} \quad , \quad (4.22)$$

mit der dynamische Matrix  $\mathbf{D}_{\text{TM}}$  für die TM-Polarisation

$$\mathbf{D}_{\text{TM}}(i) = \begin{pmatrix} \cos(\phi_i) & \cos(\phi_i) \\ n_i & -n_i \end{pmatrix} \quad , i = 1, 2. \quad (4.23)$$

Diese Gleichungen beschreiben das Verhalten ebener Wellen an einer einzelnen Grenzschicht für unendlich ausgedehnte Medien. Durch die Erweiterung sind die Gleichungen auch auf Systeme, bestehend aus mehreren Materialien, anwendbar.

#### 4.1.2 Einzelschicht

Die Reflektion und Transmission durch eine dünne Schicht ist in Abb. 4.3 schematisch dargestellt. Alle Materialien werden als verlustfrei und rein dielektrisch angenommen. Die dünne Schicht besteht aus einem Material  $n_2$  und zwei umgebenden Medien mit den Materialparametern  $n_1$  und  $n_3$ . Der Brechungsindex variiert entlang der  $x$ -Achse und ist konstant über die gesamte  $yz$ -Ebene. Die Funktion des Brechungsindex  $n(x)$  ist gegeben mit

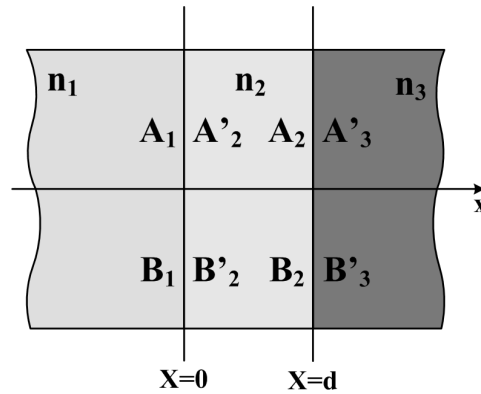


Abb. 4.3: Verhältnis der Amplituden der eingestrahlt und reflektierten Welle an den Grenzflächen einer Einzelschicht der Dicke  $d$  mit dem Brechungsindex  $n_2$ .

$$n(x) = \begin{cases} n_1 & , x < 0 \\ n_2 & , 0 < x < d \\ n_3 & , d < x \end{cases} \quad (4.24)$$

Die ebene Welle breitet sich in der  $xz$ -Fläche aus. Die Wellenausbreitung genügt der Form



$$E = E(x) e^{j(\omega t - \beta z)}$$

$$E(x) = E_R e^{-jk_x x} + E_L e^{jk_x x} = A(x) + B(x), \quad (4.25)$$

mit  $\beta$  dem Wellenvektor der z-Komponente und  $\omega$  der Kreisfrequenz. Das elektrische Feld setzt sich aus den Amplituden einer rechts (A) und links (B) laufenden Welle zusammen. Für eine einheitliche Darstellung werden die Grenzbedingungen

$$\begin{aligned} A_1 &= A(0^-), & A'_2 &= A(0^+), & A_2 &= A(d^-), & A'_3 &= A(0^+), \\ B_1 &= B(0^-), & B'_2 &= B(0^+), & B_2 &= B(d^-), & B'_3 &= B(0^+), \end{aligned} \quad (4.26)$$

definiert. Bei dem Übergang der Welle an einer Grenzschicht ändert sich die Amplitude, wie dies in Abschnitt 4.1.1 beschrieben wurde. Dabei symbolisiert (+) den Wert der Amplitude an der linken Seite und (-) den Amplitudenwert auf der rechten Seite der Grenzschicht. In Matrixform (siehe Abschnitt 4.1.1) ergibt sich an der Grenzschicht eins

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_{12} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

der Amplitudenänderung der Welle durch die dielektrische Schicht

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{j\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-j\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

und an der Grenzschicht zwei

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{D}_3 = \begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_{23} \begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Die dynamischen Matrizen  $\mathbf{D}_1$ ,  $\mathbf{D}_2$ ,  $\mathbf{D}_3$  sind polarisationsabhängig. Die Exponentialfunktion mit dem Winkel  $\alpha$  beschreibt die Amplitudenänderung der ebenen

Welle durch die Schicht bestehend aus dem Material  $n_2$ . Sie ist abhängig von der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ , der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c$  und dem Reflektionswinkel  $\phi_2$  mit den Wellenvektoren  $\beta$  und  $k_x$

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{n_2 \omega}{c} \sin(\phi_2) \\ k_{2x} &= \frac{n_2 \omega}{c} \cos(\phi_2)\end{aligned}\quad (4.30)$$

Die Wellenausbreitung in der Schicht mit der Dicke  $d$  ist durch die Matrix  $\mathbf{P}_2$  gegeben, wobei sich der Winkel  $\alpha$  der Welle durch die Schicht nach

$$\alpha_2 = k_{2x} d. \quad (4.31)$$

ändert. Die Matrizen  $\mathbf{D}_{12}$ ,  $\mathbf{D}_{23}$  beschreiben die Transmission durch eine Grenzschicht. Sie beinhalten die Amplituden der ebenen Welle auf beiden Seiten einer Grenzfläche und am Beispiel  $\mathbf{D}_{12}$  folgt mit dem Transmissionskoeffizient und Reflektionskoeffizient [50]

$$\mathbf{D}_{12} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{2x}}{k_{1x}} & 1 - \frac{k_{2x}}{k_{1x}} \\ 1 - \frac{k_{2x}}{k_{1x}} & 1 + \frac{k_{2x}}{k_{1x}} \end{pmatrix} & , \text{TE} \\ \begin{pmatrix} 1 + \frac{n_2^2}{n_1^2} \frac{k_{1x}}{k_{2x}} & 1 + \frac{n_2^2}{n_1^2} \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \\ 1 + \frac{n_2^2}{n_1^2} \frac{k_{1x}}{k_{2x}} & 1 + \frac{n_2^2}{n_1^2} \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \end{pmatrix} & , \text{TM} \end{cases} \quad (4.32)$$

Das gesamte Übertragungsverhalten einer dünnen Schicht folgt nach Substitution und Multiplikation der Gl. (4.27), Gl. (4.28) und Gl. (4.29) zu

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 \mathbf{P}_2 \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{D}_3 \begin{pmatrix} A'_3 \\ B'_3 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Die Gleichungen ermöglichen eine Beschreibung beliebig dünner Schichten oder Schichtsysteme. Eine Erweiterung auf Multischichten basiert auf der Adaption der Gl. (4.27), Gl. (4.28) und Gl. (4.29).

### 4.1.3 Multischichtsystem

Die Beschreibung eines Systems bestehend aus  $N$  Schichten ist äquivalent zu den Betrachtungen einer dünnen Schicht. Eine solche Schichtfolge ist schematisch in Abb. 4.4 dargestellt.

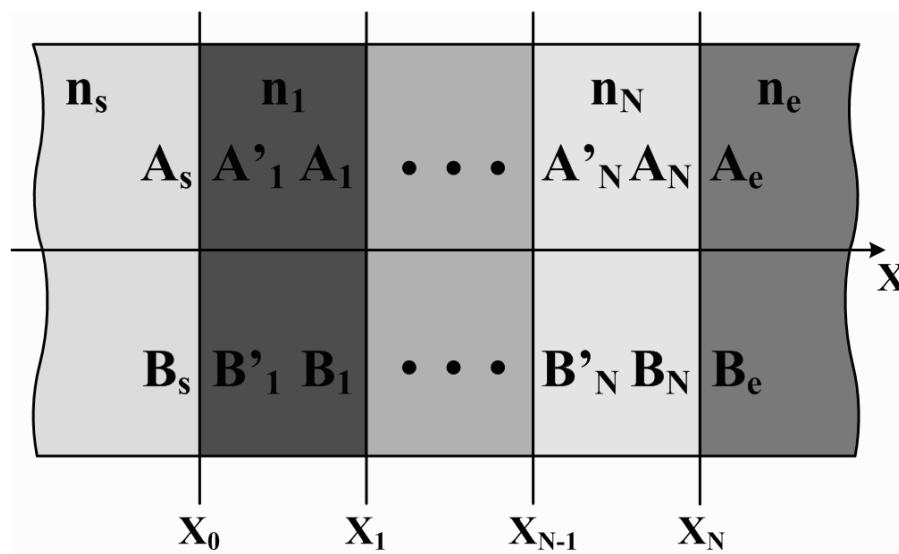


Abb. 4.4: Multischichtsystem bestehend aus  $N$  Schichten mit unterschiedlichen Brechungsindex. Die Amplituden der reflektierten und transmittierten Wellen werden an jeder Grenzschicht zwischen zwei Medien durch die Koeffizienten  $A$  und  $B$  beschrieben.

Die Schichtfolge startet mit einem Brechungsindex  $n_s$  und endet mit einem Brechungsindex  $n_e$ . Der Variation von  $n(x)$  in Abhängigkeit des Ortes folgt nach Abb. 4.4 zu

$$n(x) = \begin{cases} n_s & , x < x_0 \\ n_1 & , x_0 < x < x_1 \\ \vdots & \\ n_N & , x_{N-1} < x < x_N \\ n_e & , x_N < x \end{cases} , \quad (4.34)$$

mit dem elektrischen Feld

$$E = E(x) e^{j(\omega t - \beta z)}$$

$$E(x) = \begin{cases} A_s e^{-jk_{0x}(x-x_0)} + B_s e^{jk_{0x}(x-x_0)} & , x < x_0 \\ A_1 e^{-jk_{1x}(x-x_1)} + B_1 e^{jk_{1x}(x-x_1)} & , x_0 < x < x_2 \\ \vdots & \\ A_{N-1} e^{-jk_{(N-1)x}(x-x_{N-1})} + B_{N-1} e^{jk_{(N-1)x}(x-x_{N-1})} & , x_{N-1} < x < x_N \\ A'_N e^{-jk_{Nx}(x-x_N)} + B'_N e^{jk_{Nx}(x-x_N)} & , x_N < x \end{cases} \quad (4.35)$$

wobei die ebene Welle in der  $xz$ -Ebene liegt. Der Wellenvektor für jede Schicht ergibt sich analog der Gl. (4.30) zu

$$k_{ix} = \sqrt{\left(\frac{n_i \omega}{c}\right)^2 - \beta^2} = \frac{n_i \omega}{c} \cos(\alpha_i) \quad , i = s, 1, 2, \dots, N, e. \quad (4.36)$$

Unter Berücksichtigung der Gl. (4.27), Gl. (4.28) und Gl. (4.29) kann das Übertragungsverhalten einer beliebigen einzelnen Schicht (Abschnitt 4.1.2) dargestellt werden durch

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} &= \mathbf{D}_s^{-1} \mathbf{D}_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{pmatrix} &= \mathbf{P}_{i-1} \mathbf{D}_{i-1}^{-1} \mathbf{D}_i \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} \quad , i = 1, 2, \dots, N. \\ \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} &= \mathbf{P}_i \mathbf{D}_i^{-1} \mathbf{D}_e \begin{pmatrix} A_e \\ B_e \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Die Matrizen  $\mathbf{D}$  geben das Verhältnis der Amplituden an den Grenzflächen an. Die Matrix  $\mathbf{P}$  beschreibt die Amplitudenänderung

$$\mathbf{P}_i = \begin{pmatrix} e^{j\alpha_i} & 0 \\ 0 & e^{-j\alpha_i} \end{pmatrix} \quad , i = 1, 2, \dots, N \quad (4.38)$$

durch das Material der jeweiligen Schicht. Das gesamte Übertragungsverhalten ergibt sich zu

$$\begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_e \\ B_e \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

mit der Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \mathbf{D}_s^{-1} \left[ \prod_{i=1}^N \mathbf{D}_i \mathbf{P}_i \mathbf{D}_i^{-1} \right] \mathbf{D}_s. \quad (4.40)$$

Die Gl. (4.39) gibt die Amplituden  $A_s$ ,  $B_s$  an der Grenzschicht  $x_0$  und die Amplituden  $A_e$ ,  $B_e$  der ebenen Welle nach  $N$  Schichten an. Es ist wichtig zu bemerken, dass die Amplitude der reflektierten Welle  $B_s$  an der ersten Grenzschicht  $x_0$  die Summe aller reflektierten Wellen im System darstellt. Die Reflektionskoeffizienten berechnen sich demnach aus dem Amplitudenverhältnis der reflektierten Welle  $B_s$  und der eingestrahlten Welle unter der Bedingung, dass  $B_e$  gleich Null ist. Die Reflektion  $r$  ergibt sich aus Gl. (4.39) zu

$$r = \left. \frac{B_s}{A_s} \right|_{B_e=0} = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad (4.41)$$

und die Transmission

$$t = \left. \frac{A_e}{A_s} \right|_{B_e=0} = \frac{1}{M_{11}}. \quad (4.42)$$

Als Beispiel wird im Folgenden ein  $\lambda/4$  Multischichtsystem beschrieben, bestehend aus  $N$  Doppelschichten. Diese setzt sich aus einer Siliziumoxidschicht ( $n_1=1,4$ ) und einer Siliziumschicht ( $n_1=3,4$ ) zusammen. Die Dicke jeder einzelnen Schicht ist durch die Wellenlänge  $\lambda$ , mit  $n_1 d_1 = n_2 d_2 = \lambda/4$ , gegeben. Das Schichtsystem ist von Luft ( $n_s=n_e=1$ ) umgeben und die eingestrahlte Welle trifft mit  $\phi_0=0^\circ$  auf die Grenzschicht. Die Matrix  $\mathbf{M}$  (siehe Gl. (4.40)) folgt unter Berücksichtigung der beiden Schichten

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}_s^{-1} \left[ \mathbf{D}_1 \mathbf{P}_1 \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 \mathbf{P}_2 \mathbf{D}_2^{-1} \right]^N \mathbf{D}_e \quad (4.43)$$

mit der  $\lambda/4$  Bedingung mit  $\phi_0=0^\circ$  folgt  $\beta=0$ ,  $\cos(\phi_0)=1$  und somit  $\alpha_{1,2}=\pi/2$  und die Ausbreitungsmatrix  $\mathbf{P}$  nach Gl. (4.38) wird zu

$$\mathbf{P}_{1,2} = \begin{pmatrix} j & 0 \\ 0 & -j \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

Das Ausmultiplizieren des Klammerausdrucks von Gl. (4.43) liefert

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \mathbf{D}_s \left[ \mathbf{D}_1 \mathbf{P}_1 \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 \mathbf{P}_2 \mathbf{D}_2^{-1} \right]^N \mathbf{D}_e \\ \mathbf{M} &= \mathbf{D}_s \begin{pmatrix} -\frac{n_2}{n_1} & 0 \\ 0 & -\frac{n_1}{n_2} \end{pmatrix}^N \mathbf{D}_e. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Die Reflektion  $R=|r|^2=|m_{21}/m_{11}|^2$  für ein Schichtsystem bestehend aus N Schichten ergibt

$$R = \left[ \frac{1 - \frac{n_e}{n_s} \left( \frac{n_1}{n_2} \right)^N}{1 + \frac{n_e}{n_s} \left( \frac{n_1}{n_2} \right)^N} \right]^2. \quad (4.46)$$

Mit Luft als umgebendes Material reflektiert eine Doppelschicht 59,81% der eingestrahlten Energie. Für zwei und drei Schichten werden 89,24% bzw. 98,07% reflektiert, und für fünf Doppelschichten liegt die Reflektion bei 99,94% (siehe Abb. 4.6).

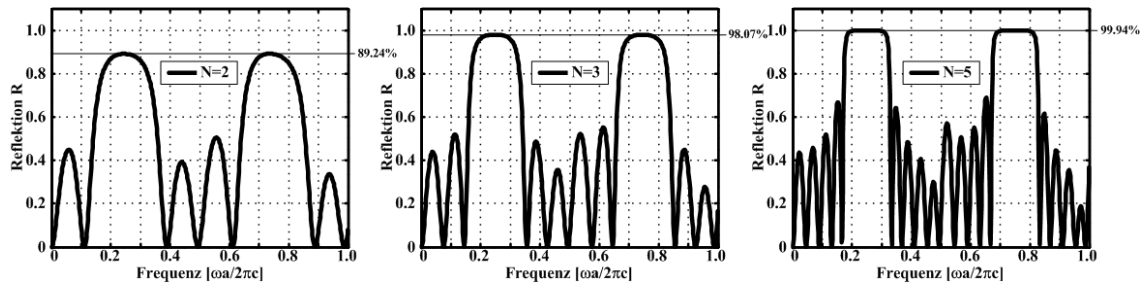


Abb. 4.5: Reflektion für ein  $\lambda/4$  Schichtsystem bestehend aus  $N$  Doppelschichten mit  $n_1=1,4$ ,  $n_2=3,4$ , und einer Dicke  $d_1 n_1 = d_2 n_2 = \lambda/4$ . Das System ist umgeben von Luft mit  $n_s=n_e=1$ . Rechts:  $N=2$ , Mitte:  $N=3$ , Links:  $N=5$ .

Das Reflektionsvermögen einer  $\lambda/4$  Schichtfolge steigt mit der Anzahl der Schichten und tangiert gegen 100% für eine große Anzahl an Schichten.

#### 4.1.4 Bragg-Stack

Theoretisch unendlich periodische Strukturen haben eine große Bedeutung bei der Berechnung photonischer Kristalle, da das Differenzialgleichungssystem (Maxwell-Gleichungen) unter dieser Randbedingung lösbar wird. Wie am Beispiel des Bragg-Spiegels gezeigt wurde, nimmt die Reflektion mit der Schichtanzahl zu und tendiert zu

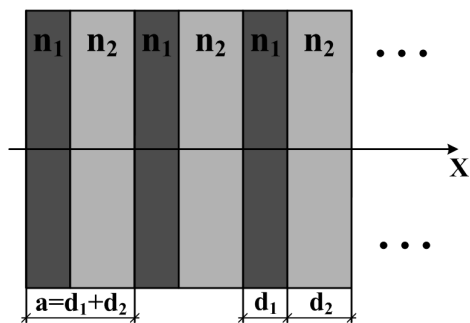


Abb. 4.6: Schematische Darstellung eines 1D photonischen Kristalls bestehend aus einer periodischen Schichtfolge, die aus zwei optisch transparenten Materialien ( $n_1$ ,  $n_2$ ) mit dem Gitterabstand  $a=d_1+d_2$  aufgebaut ist.

dem theoretischen Wert der Reflektion von 100%. Eine periodische Folge, bestehend aus zwei optischen transparenten Materialien, ist in Abb. 4.6 dargestellt. Dabei besitzt die erste Schicht den Brechungsindex  $n_1$  mit einer Dicke  $d_1$  und analog für die zweite Schicht  $n_2$  und  $d_2$ . Beide Schichten werden periodisch „gestapelt“ (Bragg-Stack),  $n(x)=n(x+a)$ , mit der Periodizität  $a$ . Die Anwendung der 2x2 Matrix-Methode erfolgt analog zu den vorangegangenen Abschnitten. Eine Welle trifft unter einem Winkel  $\phi$  auf die erste Schicht und wird an ihr reflektiert und gebrochen. Im stationären Zustand stellen

sich die Amplitudenverhältnisse  $A$ ,  $B$  an beiden Seiten der Grenzschicht ein, wobei der 1D Kristall in der  $zy$ -Ebene invariant ist. Die Wellenvektoren in  $x$ -Richtung  $k_x$  in beiden Medien ergeben sich nach Gl. (4.36) mit den Einstrahlwinkeln an den Grenzflächen jeder Schicht  $\alpha_{1,2}$  zu

$$\begin{aligned}
k_{1x} &= \sqrt{\left(\frac{n_1 \omega}{c}\right)^2 - \beta^2} = \frac{n_1 \omega}{c} \cos(\alpha_1) \\
k_{2x} &= \sqrt{\left(\frac{n_2 \omega}{c}\right)^2 - \beta^2} = \frac{n_2 \omega}{c} \cos(\alpha_2)
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Bei der Beschreibung des dynamischen Verhaltens an der k-ten Doppelschicht werden die Amplituden an jeder Grenzschicht ermittelt wobei a, b die erste Schicht und c, d die zweite Schicht repräsentieren

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} a_{k-1} \\ b_{k-1} \end{pmatrix} &= \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 \mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} c_k \\ d_k \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} c_k \\ d_k \end{pmatrix} &= \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{D}_1 \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{4.48}$$

mit den Matrizen  $\mathbf{P}_{1,2}$  nach Gl. (4.38),  $\alpha_1 = k_{1x} d_1$  und  $\alpha_2 = k_{2x} d_2$ . Nach dem Eliminieren der Koeffizienten c, d für die Grenzschicht zwischen den beiden Schichten ergibt sich das Übertragungsverhalten einer Doppelschicht allgemein

$$\begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\text{TE,TM}} & \mathbf{B}_{\text{TE,TM}} \\ \mathbf{C}_{\text{TE,TM}} & \mathbf{D}_{\text{TE,TM}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{4.49}$$

Die Matrizen  $\mathbf{D}$  sind abhängig von der Polarisation der eingestrahnten Welle und somit das Übertragungsverhalten, welches durch die Indizierung von TE, TM zum Ausdruck kommt. Das Ausmultiplizieren der Gl. (4.48) unter Berücksichtigung einer TE-polarisierten Welle mit Gl. (4.32) und Gl. (4.38) folgt für die Koeffizienten [50]



$$\begin{aligned}
A_{\text{TE}} &= \left[ \cos(k_{2x} d_2) + \frac{1}{2} j \left( \frac{k_{2x}}{k_{1x}} + \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{jk_{1x} d_1} \\
B_{\text{TE}} &= \left[ \frac{1}{2} j \left( \frac{k_{2x}}{k_{1x}} - \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{-jk_{1x} d_1} \\
C_{\text{TE}} &= \left[ -\frac{1}{2} j \left( \frac{k_{2x}}{k_{1x}} - \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{jk_{1x} d_1} \\
D_{\text{TE}} &= \left[ \cos(k_{2x} d_2) - \frac{1}{2} j \left( \frac{k_{2x}}{k_{1x}} + \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{-jk_{1x} d_1}
\end{aligned} \tag{4.50}$$

und für TM-Polarisation

$$\begin{aligned}
A_{\text{TM}} &= \left[ \cos(k_{2x} d_2) + \frac{1}{2} j \left( \frac{n_2^2 k_{2x}}{n_1^2 k_{1x}} + \frac{n_1^2 k_{1x}}{n_2^2 k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{jk_{1x} d_1} \\
B_{\text{TM}} &= \left[ \frac{1}{2} j \left( \frac{n_2^2 k_{2x}}{n_1^2 k_{1x}} - \frac{n_1^2 k_{1x}}{n_2^2 k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{-jk_{1x} d_1} \\
C_{\text{TM}} &= \left[ -\frac{1}{2} j \left( \frac{n_2^2 k_{2x}}{n_1^2 k_{1x}} - \frac{n_1^2 k_{1x}}{n_2^2 k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{jk_{1x} d_1} \\
D_{\text{TM}} &= \left[ \cos(k_{2x} d_2) - \frac{1}{2} j \left( \frac{n_2^2 k_{2x}}{n_1^2 k_{1x}} + \frac{n_1^2 k_{1x}}{n_2^2 k_{2x}} \right) \sin(k_{2x} d_2) \right] e^{-jk_{1x} d_1}
\end{aligned} \tag{4.51}$$

Mittels des Bloch-Theorems für ein unendlich ausgedehntes periodisches System folgt, dass die Energie eine periodische Funktion mit der Periode  $a$  ist. Die Lösung der Wellengleichung für eine in  $z$ -Richtung sich ausbreitende Welle in einem periodischen Medium mit einem Brechungsindexprofil  $n(x)=n(a+x)$  ist [50]

$$E_k(x, z) = E_k(x) e^{-j\beta z} e^{-jkx} \tag{4.52}$$

Die Indizierung zeigt die Abhängigkeit der Energie von den Bloch-Wellen. In der Matrixschreibweise folgt

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{-jka} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} \tag{4.53}$$

Der Vergleich mit Gl. (4.49) liefert unter Berücksichtigung der Bloch-Wellen das folgende Eigengleichungssystem

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{jka} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

Dabei entspricht der Phasenfaktor  $e^{jka}$  den Eigenwerten des Systems

$$e^{jka} = \frac{1}{2}(A+D) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(A+D)^2 - 1}, \quad (4.55)$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ e^{jka} - A \end{pmatrix}. \quad (4.56)$$

Die Lösung der Eigenwerte der Gl. (4.55) gibt die Dispersionsrelation zwischen  $\beta$ ,  $\omega$ , und  $k$  für die Bloch-Wellen an

$$k(\beta, \omega) = \frac{1}{a} \cos^{-1} \left( \frac{1}{2} (A_{\text{TE,TM}} + D_{\text{TE,TM}}) \right). \quad (4.57)$$

Bei einer senkrechten Einstrahlung  $\beta=0$  wird  $A_{\text{TE}}=A_{\text{TM}}$  und  $D_{\text{TE}}=D_{\text{TM}}$ . Die Lösung der Gl. (4.55) für das in Abb. 4.6 dargestellte periodische Schichtsystem mit dem Brechungsindex  $n_1=1,4$  und dem Brechungsindex des zweiten Materials  $n_2=3,4$  mit den Schichtdicken  $d_1=0,7a$  und  $d_2=0,3a$  ist in Abb. 4.7 dargestellt.

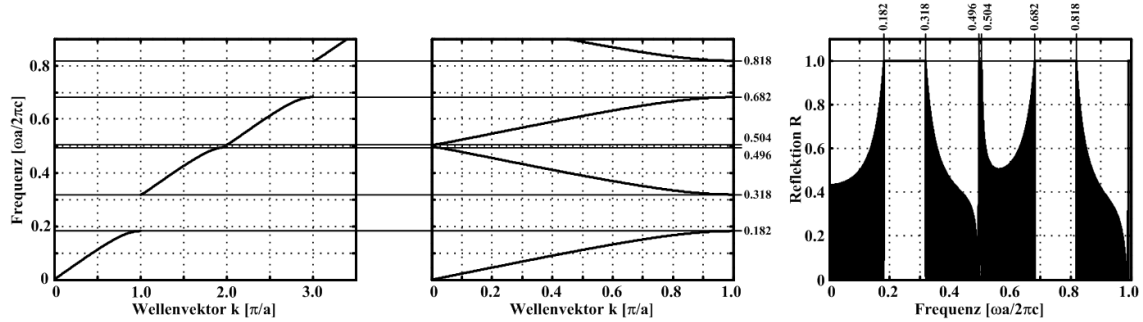


Abb. 4.7: *Links*: Banddiagramm für ein semiunendlich ausgedehnten Bragg-Stack mit  $n_1=1,4$ ,  $n_2=3,4$ ,  $d_1=0,7a$ ,  $d_2=0,3a$  nach Gl. (4.57). *Mitte*: Reduzierte Darstellung des Banddiagramms. *Rechts*: Berechnung der Reflektion  $R$  nach Gl. (4.46) für einen Bragg-Stack bestehend aus  $N=500$  Schichten.

Eine kompakte und übliche Darstellung ergibt sich aus der Verschiebung der Bänder auf die x-Ordinate, wobei jedes Band mit einem geraden Index zusätzlich gespiegelt wird (siehe Abb. 4.7 *Mitte*). Die Lösung über die Bloch-Wellen und die Lösung für ein Multischichtsystem führen auf dieselben Lösungen unter der Annahme, dass die Anzahl der Schichten  $N$  sehr groß wird.

Die Diagramme zeigen Bereiche, bei denen eine 100%ige Reflektion der eingestrahnten Energie auftritt. Diese Bereiche entsprechen den photonischen Bandlücken. Wird eine Welle mit einer Frequenz innerhalb der Bandlücke in einen photonischen Kristall eingestrahlt, wird diese vollständig reflektiert, oder eine Welle dieser Frequenz ist nicht ausbreitungsfähig in diesem Kristall.

#### 4.1.5 1D omnidirektionaler photonischer Kristall

Die Beispiele im letzten Abschnitt beschränkten sich auf eine senkrechte Einstrahlung ( $\beta=0$ ,  $\theta=0^\circ$ ). Eine elektromagnetische Welle, die in Abhängigkeit des Einstrahlungswinkels  $\theta$  auf ein Multischichtsystem, bestehend aus zwei Materialien  $n_1$  und  $n_2$  mit den auf die Gitterkonstante normierten Dicke  $d_1$  und  $d_2$ , fällt, ist schematisch in Abb. 4.8 dargestellt. Für einen Einstrahlungswinkel ( $\theta>0^\circ$ ) bilden sich TE- und TM Moden aus, die in Abhängigkeit von  $\theta$  unterschiedliche Bandlücken

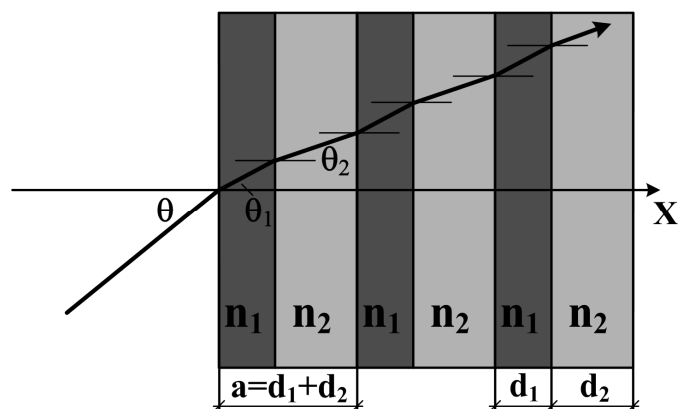


Abb. 4.8: Schematische Darstellung eines 1D photonischen Kristalls mit variierendem Einstrahlungswinkel  $\theta$ .

ausbilden. Das Einsetzen der Gl. (4.21) und Gl. (4.23) in die Eigenwertgleichung Gl. (4.57) liefert die Lösungen in Abhängigkeit von der Frequenz und des

Einstrahlungswinkels  $\theta$ . Die Berechnung ist in Abb. 4.9 für ein Schichtsystem, bestehend aus zwei Materialien mit  $n_1=1,4$  und  $n_2=3,4$  bei einer normierten Schichtdicke mit  $d_1=0,3a$  und  $d_2=0,7a$ , dargestellt.

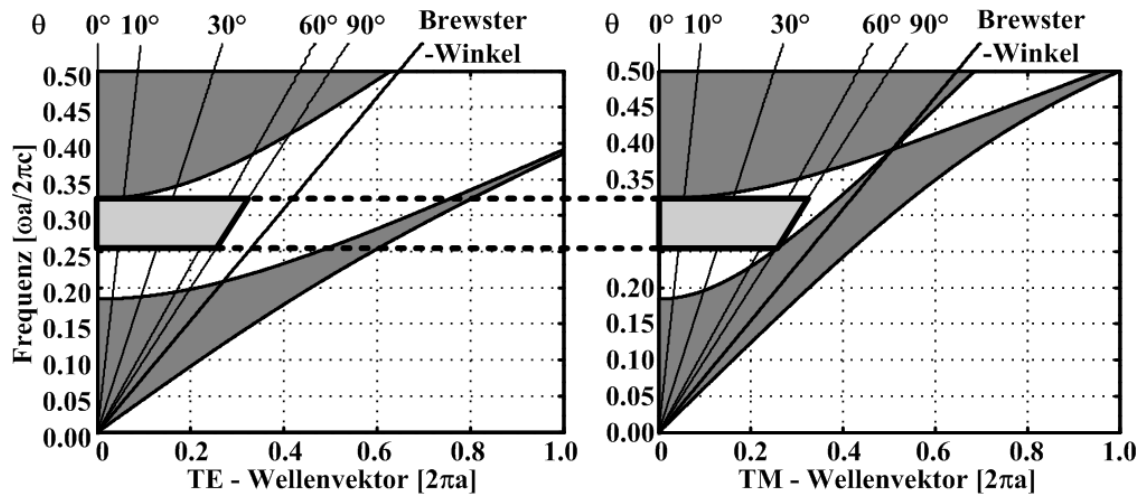


Abb. 4.9: TE und TM Bandlücke als eine Funktion des Wellenvektors und des Einstrahlungswinkels  $\theta$  für einen semiunendlich ausgedehnten 1D photonischen Kristall mit  $n_1=1,4$ ,  $n_2=3,4$ ,  $d_1=0,7$ ,  $d_2=0,3a$ .

Mit ansteigendem Einstrahlungswinkel  $\theta$  verschieben sich die Bandlücken für die TE- und TM-Polarisation zu höheren Frequenzen. Die Frequenzbereiche, bei denen eine Bandlücke für beide Polarisationen und über alle Winkel von  $\theta=0^\circ$  bis  $\theta=90^\circ$  existieren, entspricht einer omnidirektionalen Bandlücke. Die omnidirektionale Bandlücke ermöglicht eine Reflektion elektromagnetischer Wellen, unabhängig von der Polarisation und des Einstrahlungswinkels in diesem Frequenzbereich [51-53]. Die Existenz einer omnidirektionalen Bandlücke wurde durch Messungen an Multischichtsystemen nachgewiesen [54, 55].

## 4.2 Ebene Wellenmethode

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, photonische Kristalle und optischen Systeme zu berechnen. Eine Variante für die Berechnung eindimensionaler (1D) Strukturen mittels der 2x2-Matrix-Methode wurde in den vorangegangenen Abschnitten beschrieben. Die Lösung komplexerer Systeme, wie zweidimensionaler (2D) und dreidimensionaler (3D) Strukturen, ist sehr aufwendig und rechenintensiv. In der Literatur werden Verfahren beschrieben, um auch höher dimensionale photonische Kristalle effektiv zu berechnen. Eine universelle Methode sind die finiten Differenzen im Zeitbereich (FDTD – Finit Difference Time Domain) [56-63]. Dabei wird das Feldgebiet in Elementarzellen aufgeteilt und die partiellen Ableitungen der Maxwell-Gleichungen durch Differenzen ersetzt und gelöst. Eine weitere Methode basiert ebenso auf den finiten Differenzen.

Diese berechnet das Feldgebiet im Frequenzbereich (FDFD). Der Nachteil dieser beiden Methoden besteht in der sehr speicheraufwendigen Berechnung, die ohne vernetzte Computer kaum zu lösen sind. Eine effiziente Berechnung ist die ebene Wellenmethode [30, 32, 64-68]. Diese erlaubt eine analytische Lösung der Fourier-Transformation des periodischen Gitters im 2D und für spezielle Funktionen auch im 3D (siehe Anhang A.6.3).

Ausgangspunkt der Herleitung für die ebene Wellenmethode sind die Maxwell-Gleichungen für ein quellenfreies, isotropes, verlustfreies, dielektrisches Medium  $\varepsilon(\mathbf{r})$  im Frequenzraum

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= j\omega\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega\mu_0\mathbf{H} & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned} \quad (4.58)$$

Nach der Division mit  $\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})=\varepsilon$  und Rotationsbildung ergibt sich

$$\begin{aligned} \nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= j\omega \nabla \times \mathbf{E} \\ \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega\mu \nabla \times \mathbf{H} \end{aligned} \quad (4.59)$$

Die Substitution der Rotation aus Gl (4.58) liefert die entkoppelten Maxwell-Gleichungen für das elektrische Feld

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}, \quad (4.60)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c = \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ , der ortsabhängigen Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon(\mathbf{r})$ , und das magnetische Feld

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}. \quad (4.61)$$

Das Bloch-Theorem liefert den Ansatz

$$\mathbf{H} = h(\mathbf{r}) e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.62)$$

Dabei sei  $h(\mathbf{r})$  eine beliebige Funktion mit der Periode des Gitters und der Fourier-Transformation

$$\mathbf{H} = \sum_{\xi} H_{\xi} e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\xi} H_{\xi} e^{j(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.63)$$

mit dem reziproken Gittervektor  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{k}$ , dem Wellenvektor in der 1. Brillouin-Zone. Die einzelnen Bloch-Wellen werden mit  $\xi$  nummeriert. Das komplexe Differentialgleichungssystem ist abhängig von der Anzahl  $N_G$  der reziproken Gittervektoren. Es ergibt sich somit unter Berücksichtigung der Koordinaten  $x, y, z$  ein  $3N_G \times 3N_G$  großes Matrixproblem. Die Lösung der Maxwell-Gleichungen mit  $\text{div}(\mathbf{H})=0$ , wobei der Wellenvektor senkrecht zu den Feldern steht, reduziert das Matrixproblem auf ein  $2N_G \times 2N_G$  Eigenwertproblem [30, 64, 68]. Dabei werden zwei neue Koordinatenachsen  $\hat{\mathbf{e}}_v$  eingeführt, mit  $v=1,2$ , die orthogonal zu  $(\mathbf{k} + \mathbf{G})$  stehen. Die Einheitsvektoren  $\hat{\mathbf{e}}_1$ ,  $\hat{\mathbf{e}}_2$  und  $(\mathbf{k} + \mathbf{G})$  bilden ein rechtwinkliges Koordinatensystem, und Gl. (4.63) reduziert sich auf

$$\mathbf{H} = \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi}) \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}}. \quad (4.64)$$

Die Fourier-Transformation der periodischen Dielektrizitätskonstante einer Basiszelle  $\varepsilon(\mathbf{r})$  ergibt sich nach Gl. (3.34) zu

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\varsigma} \eta(\mathbf{G}_{\varsigma}) e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.65)$$

Das Einsetzen von Gl. (4.64) und Gl. (4.65) in Gl. (4.61) führt nach einigen Umformungen (siehe Anhang A.2) auf ein Eigengleichungssystem [29, 30]

$$\sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma}, \xi}^{-1} \left\| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\gamma} \right\| \left\| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi} \right\| \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_{\gamma}} & -\hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_{\gamma}} \\ -\hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_{\gamma}} & \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_{\gamma}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_{\gamma}} \\ \mathbf{H}_{2, \mathbf{G}_{\gamma}} \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_{\xi}} \\ \mathbf{H}_{2, \mathbf{G}_{\xi}} \end{bmatrix}. \quad (4.66)$$

Die Gleichung stellt die allgemeine ebene Wellen-Lösung für ein 3D Problem dar. Diese kann je nach Anwendung und Dimension reduziert und effektiv gelöst werden.

### 4.2.1 1D photonischer Kristall

Ein eindimensionaler unendlich ausgedehnter photonischer Kristall ist schematisch in Abb. 2.1 dargestellt. Er besteht aus zwei Materialien  $n_1$  und  $n_2$  die entlang der x-Achse sich mit der Gitterkonstanten  $a$  periodisch wiederholen. Dabei sei  $d_1$  die Dicke der Schicht mit dem Material  $n_1$  und  $d_2$  die Schichtdicke des zweiten Materials mit  $n_2$ . Alle Längeneinheiten werden auf die Gitterkonstante  $a$  normiert. Das periodische Gitter  $n(x)=n(x+a)$  wird über den Translationsvektor  $T=ma$  abgebildet, wobei  $m$  eine beliebige ganze Zahl darstellt. Der reziproke Gittervektor  $\mathbf{G}$  besitzt lediglich eine x-Komponente. Durch die Wahl der Einheitsvektoren mit den Vektoren für ein kartesisches Koordinatensystem mit  $\hat{\mathbf{e}}_1 = \hat{\mathbf{y}}$  und  $\hat{\mathbf{e}}_2 = \hat{\mathbf{z}}$  folgt aus Gl. (4.66) für den 1D Kristall

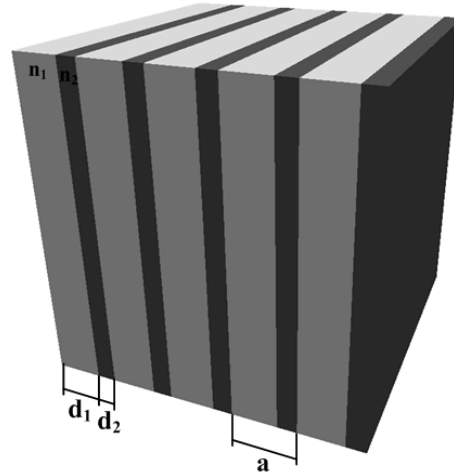


Abb. 4.10: 1D photonischer Kristall bestehend aus unendlich vielen Doppelschichten mit der Periodizität  $a$ . Jede Doppelschicht besteht aus einem Material  $n_1$  mit der Dicke  $d_1$  und einem zweiten Material  $n_2$  mit  $d_2$ .

$$\sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma}, \xi}^{-1} \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\gamma} \right| \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi} \right| \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_{\gamma}} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_{\xi}}. \quad (4.67)$$

Die TE- und TM-Polarisationen sind für den eindimensionalen Fall unter der Bedingung der senkrechten Einstrahlung identisch. Die Berechnung einer Bandstruktur für  $n_1=1,4$  und  $n_2=3,4$ , wobei die Schichtdicken  $d_1=0,7a$  und  $d_2=0,3a$  entsprechen, ist in Abb. 4.11 dargestellt.

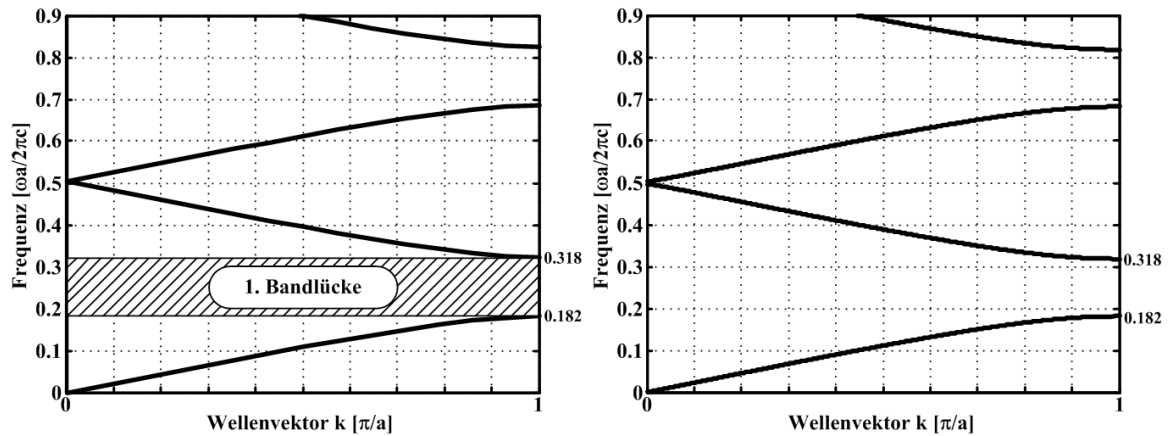


Abb. 4.11: Banddiagramm eines 1D photonischen Kristalls bestehend aus einem periodischen Zweischichtsystem mit  $n_1=1,4$ ,  $d_1=0,7a$ ,  $n_2=3,4$  und  $d_2=0,3a$ . *Links*: Berechnet nach Gl. (4.67) *Rechts*: Berechnet mit der 2x2-Matrix-Methode nach Gl. (4.57).

Die Berechnung der Bandstruktur über die ebene Wellenmethode liefert dasselbe Ergebnis wie die Berechnung über die 2x2-Matrix-Methode (Abb. 4.11 *Rechts*).

#### 4.2.2 2D photonischer Kristall

Ein 2D photonischer Kristall ist in Abb. 4.12 dargestellt. Der Brechungsindex variiert periodisch in der  $x$ - und  $y$  Richtung. In  $z$  Ausdehnung ist der Kristall theoretisch unendlich ausgedehnt. Das Bild zeigt zwei verschiedene Arten eines quadratischen Gitters, welches zum einen aus Stäben, mit einem Brechungsindex  $n_2$ , umgeben von einem weiteren Material  $n_1$ , oder aus einem Substrat ( $n_1$ ) mit „Löchern“ aus  $n_2$  besteht.

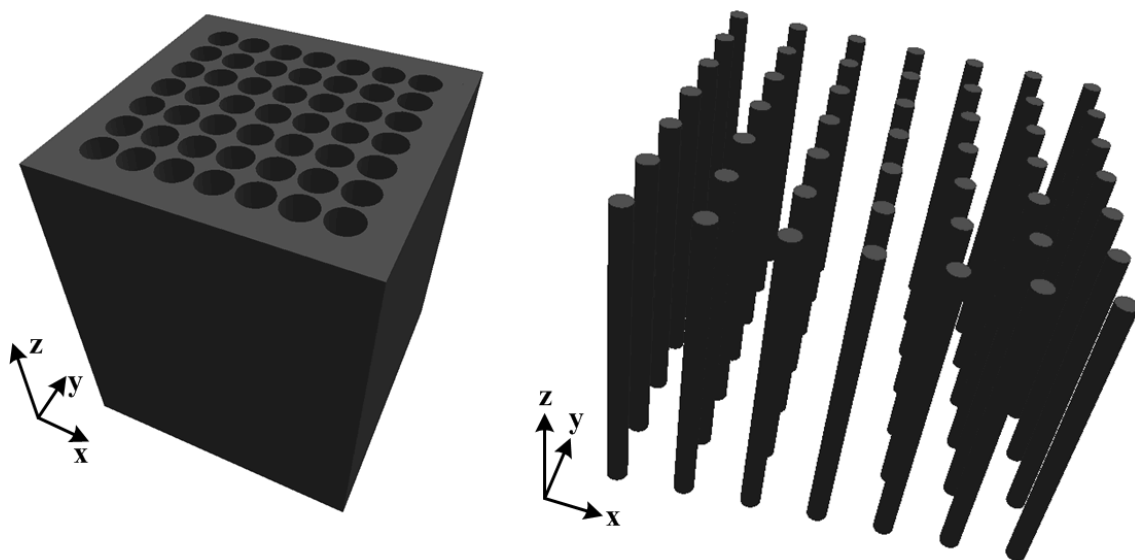


Abb. 4.12: Schematische Darstellung von zwei quadratischen 2D photonischen Kristallen. Die Ausdehnung in  $z$ -Richtung ist theoretisch unendlich. *Links*: 2D photonischer Kristall bestehend aus einem Material  $n_1$  und „Löchern“ aus einem Material  $n_2$  (Luft) *Rechts*: 2D photonischer Kristall bestehend aus Stäben mit einem Brechungsindex  $n_2$  umgeben von einem Material  $n_1$ .



Bei der senkrechten Einstrahlung in einen 2D photonischen Kristall liegt der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und der reziproke Gittervektor  $\mathbf{G}$  in derselben xy-Ebene und daraus folgend  $(\mathbf{k}+\mathbf{G})$ . Ein Einheitsvektor wird senkrecht zur xy-Ebene, mit  $\hat{\mathbf{e}}_2 = \hat{\mathbf{z}}$  gewählt. Der zweite Einheitsvektor liegt ebenso in der xy-Ebene, senkrecht zu  $\hat{\mathbf{e}}_2$  und senkrecht zu  $(\mathbf{k}+\mathbf{G})$ , mit  $\hat{\mathbf{e}}_1 = (\cos(\alpha); \sin(\alpha); 0)^T$  [30].

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_\gamma} & -\hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_\gamma} \\ -\hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_\gamma} & \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha - \alpha') \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

Eingesetzt in die Eigenwertgleichung Gl. (4.66) liefert die entkoppelten Eigenwertgleichungen für die TM-Polarisation

$$\sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma,\xi}}^{-1} \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\gamma} \right| \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi} \right| \mathbf{H}_{1,\mathbf{G}_{\gamma}} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{1,\mathbf{G}_{\xi}} \quad (4.69)$$

und die TE-Polarisation

$$\sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma,\xi}}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\gamma}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi}) \mathbf{H}_{2,\mathbf{G}_{\gamma}} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_{2,\mathbf{G}_{\gamma}} \quad (4.70)$$

mit der Fourier-Transformation von  $\eta(\mathbf{G})$  der Basiszelle des photonischen Kristalls

$$\eta(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_{\text{Zelle}}} \iint_{\text{Zelle}} \varepsilon(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} dA. \quad (4.71)$$

Die Integration über die Basiszelle, wie im Abschnitt 3.1 beschrieben, ergibt für das quadratische Gitter mit dem Zylinderradius  $R$  (siehe Anhang A.1) und dem Betrag des reziproken Gittervektors

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} 2f_R \varepsilon_2 + (1 - 2f_R) & , \mathbf{G} = \mathbf{0} \\ 2f_R (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R)}{|\mathbf{G}|R} & , \mathbf{G} \neq \mathbf{0} \end{cases} \quad (4.72)$$

Das Einsetzen der Gl. (4.72) mit den Geometrie- und Materialparametern in die entkoppelten Eigenwertgleichungen Gl. (4.69), Gl. (4.70) liefert die in Abb. 4.13 dargestellten Banddiagramme für ein quadratisches Gitter.

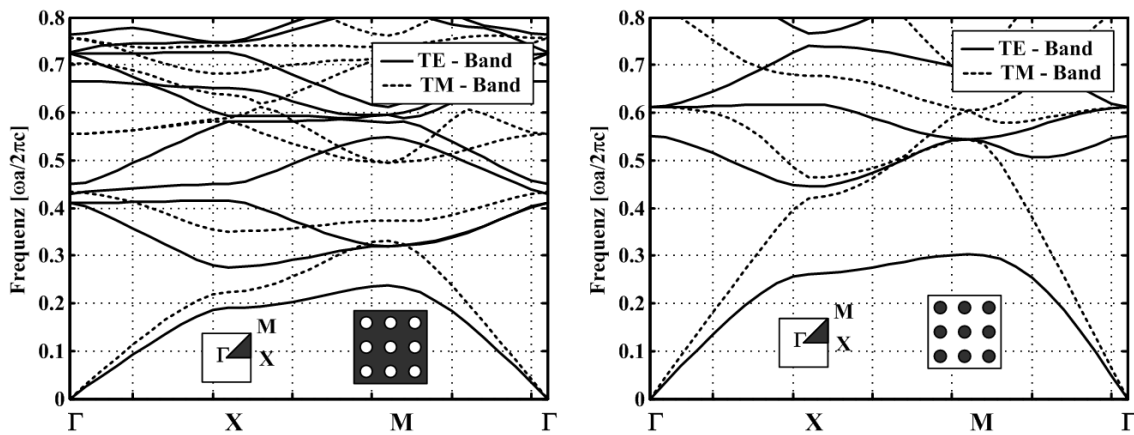


Abb. 4.13: Banddiagramme für ein quadratisches Gitter berechnet nach Gl. (4.69) und Gl. (4.70) *Links*:  $n_1=3,4$ ,  $n_2=1$ ,  $R=0,46a$  *Rechts*:  $n_1=1$ ,  $n_2=3,4$ ,  $R=0,18a$ .

Je nach Ausprägung des Gitters ergeben sich unterschiedliche Banddiagramme. Für das quadratische Gitter, Abb. 4.13 *Links*, resultiert eine TE-Bandlücke zwischen Band 1 und 2 und eine Bandlücke für die TM-Polarisation zwischen Band 2 und 3. Im Gegensatz dazu existiert keine TM-Bandlücke für das quadratische Gitter, bestehend aus Stäben umgeben von Luft. Die Bandstrukturen sind abhängig von den Materialparametern und den geometrischen Eigenschaften (siehe Anhang A.1) des zugrunde liegenden photonischen Kristalls.

### 4.2.3 Superzellen-Berechnung

Die Berechnung von ausbreitungsfähigen Moden in einem photonischen Kristall basiert auf der Superzellenmethode. Die Grundzelle besteht aus einer Anzahl von Basiszellen wie in Abb. 4.14 dargestellt. Dazu wird die Basiszelle mit Hilfe der Verschiebungsfunktion der Fourier-Transformation an die jeweiligen Orte verschoben und mit einem zentralen Defekt (Wellenleiter) überlagert. Die Berechnung wird am Beispiel eines hexagonalen Gitters beschrieben.

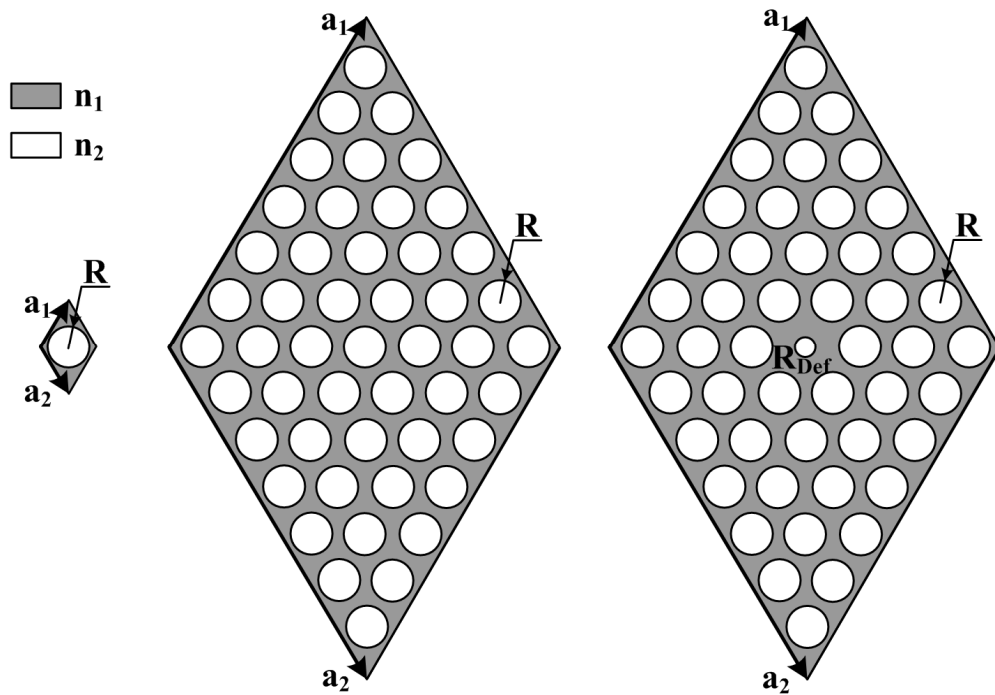


Abb. 4.14: Schematische Darstellung von hexagonalen Gittern. *Links*: Basiszelle *Mitte*: 7x7 Superzelle ohne Defektstruktur *Rechts*: 7x7 Basiszelle mit einem zentralen Defekt mit dem Radius  $R_{\text{Def}}$ .

Die Basiszelle eines hexagonalen Gitters ist in Abb. 4.14 *Links* dargestellt. Die Integration

$$\eta(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_{\text{Zelle}}} \iint_{\text{Zelle}} \varepsilon(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} dA \quad (4.73)$$

liefert

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} f_R \varepsilon_2 + (1 - f_R) \varepsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2f_R (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R)}{|\mathbf{G}|R} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (4.74)$$

mit dem Füllfaktor

$$f_R = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R^2} \quad (4.75)$$

und den Gittervektoren der Basiszelle  $\mathbf{a}_1 = 1/2a(\sqrt{3}; 1)^T$  und  $\mathbf{a}_2 = 1/2a(\sqrt{3}; -1)^T$ . Die Lösung der Eigenwertgleichung für einen perfekten hexagonalen photonischen Kristall, mit  $n_1=3,4$ ,  $n_2=1$  und dem normierten Radius  $R=0,45a$ , ist in Abb. 4.15 *Links* dargestellt. Es entsteht eine TE Bandlücke zwischen Band 2 und 3 und eine TM Bandlücke zwischen Band 1 und 2 mit einer resultierenden absoluten Bandlücke beider Polarisationen von 0,4054 bis 0,4453.

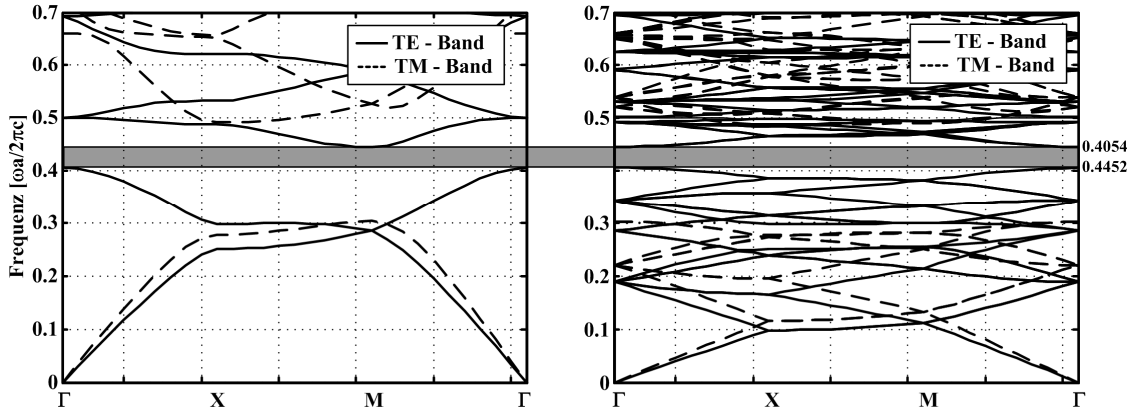


Abb. 4.15: Banddiagramme eines hexagonalen Gitters berechnet nach Gl. (4.69) und Gl. (4.70) für  $n_1=3,4$ ,  $n_2=1$ ,  $R=0,45a$  mit 961 ebenen Wellen und einer absoluten Bandlücke für TE und TM Moden (grau) von 0,4054 bis 0,4452. *Links*: 1 Basiszelle *Rechts*: 3x3 Superzellen.

Eine Superzelle wird durch ein Vielfaches des normalen Gittervektors  $\mathbf{a}_1 = (2N+1)/2a(\sqrt{3}; 1)^T$  und  $\mathbf{a}_2 = (2N+1)/2a(\sqrt{3}; -1)^T$  aufgespannt (Abb. 4.14 *Mitte*). Dazu wird die Basiszelle von  $-N$  bis  $N$  auf der x- und y-Achse verschoben, um die perfekte Superzelle zu erzeugen. Durch die Änderung der Gittervektoren verändern sich ebenfalls die reziproken Gittervektoren  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$ . Mittels des Verschiebungssatz ergibt sich die Fourier-Transformation von  $\eta_{\text{SZelle}}$  zu

$$\eta_{\text{SZell}}(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{(2N+1)^2} \eta(0) & , \mathbf{G} = 0 \\ \sum_{m_x, m_y = -N}^N \eta(\mathbf{G}) e^{-\frac{j\mathbf{G} \cdot (m_x \mathbf{a}_1 + m_y \mathbf{a}_2)}{2N+1}} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (4.76)$$

Die Berechnung für  $N=1$  ist in Abb. 4.15 *Mitte* dargestellt. Für einen perfekten Kristall ändert sich die Bandausprägung. Die Bandlücke ist unabhängig von der Superzelle und die Nummer der unteren Bandkante lässt sich berechnen aus der Nummer der Bandkante  $N_{\text{Band}}^{\text{TE, TM}}$  der einfachen Basiszelle und der Anzahl  $N$  nach

$$N_{\text{Band,SZell}}^{\text{TE,TM}} = N_{\text{Band}}^{\text{TE,TM}} (2N+1)^2. \quad (4.77)$$

Durch Einbringen einer Defektstruktur, wie in Abb. 4.15 *Rechts* dargestellt, ergibt sich die Fourier-Transformation zu

$$\eta_{\text{SZell}}(\mathbf{G}) = \begin{cases} \frac{1}{(2N+1)^2 - 1} \eta(0) + f_{\text{R}_{\text{Def}}} \varepsilon_2 + (1 - f_{\text{R}_{\text{Def}}}) \varepsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \sum_{m_x, m_y = -N}^N \eta(\mathbf{G}) e^{-\frac{j\mathbf{G} \cdot (m_x \mathbf{a}_1 + m_y \mathbf{a}_2)}{2N+1}} \delta_{m_x, m_y \neq 0} + \dots & \\ + 2f_{\text{R}_{\text{Def}}} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| R_{\text{Def}})}{|\mathbf{G}| R_{\text{Def}}} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (4.78)$$

Das Einsetzen der Fourier-Transformation in die Eigenwertgleichung liefert das Banddiagramm für eine Superzelle mit einer Defektstruktur. In Abhängigkeit vom Design des Wellenleiters (Defekte) ergibt sich eine Anzahl an ausbreitungsfähigen Moden.

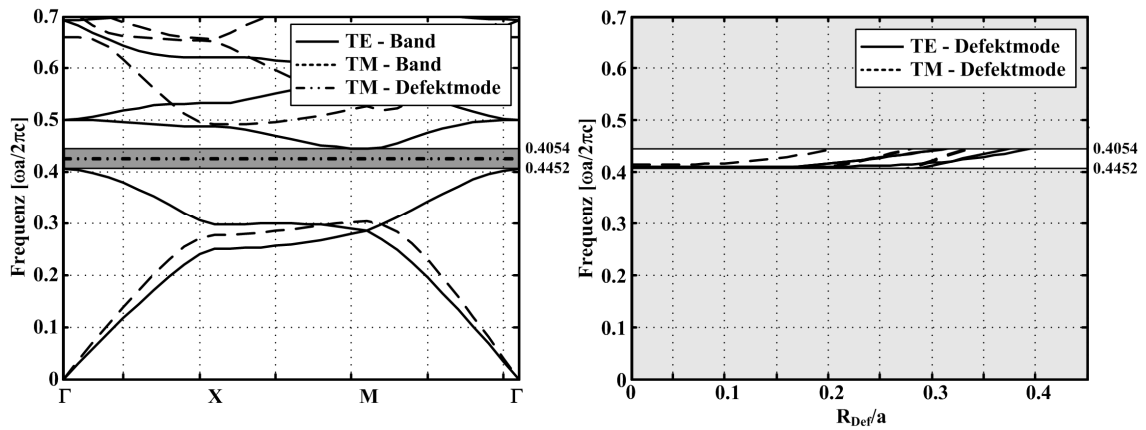


Abb. 4.16: *Links*: Banddiagramm eines hexagonalen Gitters mit den TM Moden in einer Defektstruktur für  $n_1=3,4$ ,  $n_2=1$ ,  $R=0,45a$  mit 961 ebenen Wellen und einem Defektradius von  $R_{\text{Def}}=0,25a$  bestehend aus einem Material  $n_{\text{Def}}=1$  (Luft). *Rechts*: Änderung der normierten Frequenz als Funktion des Defektradius  $R_{\text{Def}}$  für die TE- und TM Defektmodes.

Die Berechnung von Wellenleiterstrukturen und den optischen Eigenschaften der ausbreitungsfähigen Moden erfolgt nach der Superzellenmethode.

### 4.3 Photonische Lichtwellenleiter

Licht wurde frühzeitig genutzt, um Informationen über weite Strecken zu übertragen. Schon die Griechen und Römer nutzten Feuerzeichen für einfache Kommunikation oder als Warnzeichen (Leuchttürmen der Antike). Das grundlegende Prinzip änderte sich kaum bis hin zum Flügeltelegraph, bei dem durch Ändern von Signallatten unterschiedliche Buchstaben zu einer entfernten Station gesendet werden konnten. Die Datenrate bei der Übertragung von Informationen war stark durch die Transparenz des Mediums (Nebel, Regen, usw.) begrenzt. Eine effektive Übertragung von Informationen wurde erst durch die Entwicklung des LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) und erste Lichtwellenleiter, welche Anfang der siebziger Jahre durch *Corning Glass Works* mittels OVD (outside vapor decomposition) hergestellt wurden, ermöglicht.

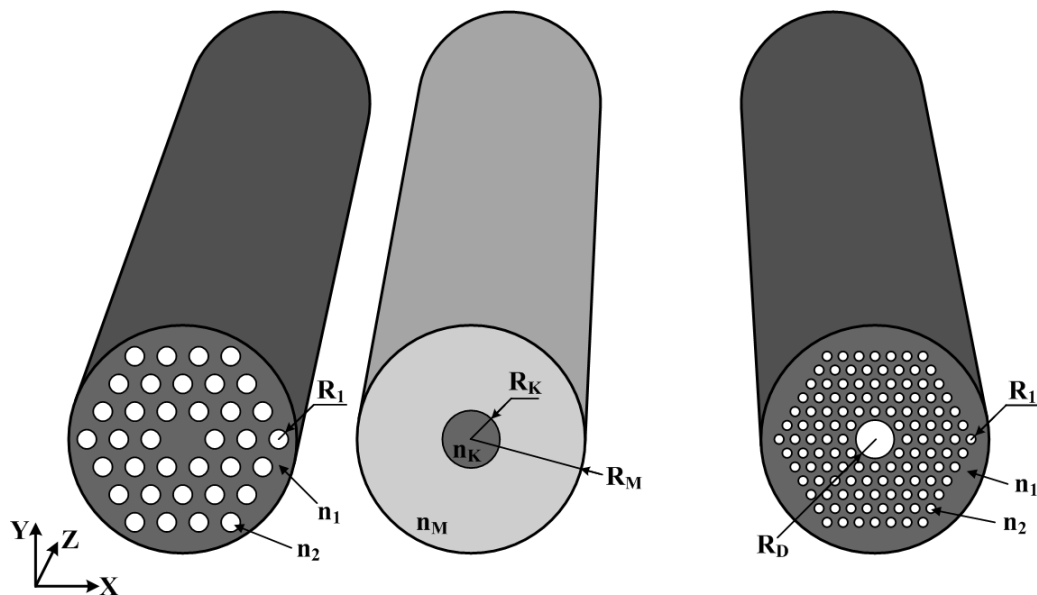


Abb. 4.17: Schematische Darstellung von unterschiedlichen Typen von Lichtwellenleitern. Das Brechungsindexprofil  $n(x,y)$  variiert entlang der  $x$ - und  $y$ -Achsen und ist invariant entlang der  $z$ -Achse. *Links*: Lichtwellenleiter basieren auf dem Prinzip der internen Totalreflektion, wobei der Brechungsindex des Kerns ( $n_K$ ) größer ist als der Brechungsindex des Mantels ( $n_M$  ( $n_{eff}$ )). *Rechts*: Lichtwellenleiter mit einer periodischen dielektrischen Struktur  $n(x,y)$  in der Größenordnung der Wellenlänge  $\lambda$ . Dies ermöglicht, basierend auf dem photonischen Kristalleffekt, eine Wellenausbreitung im niedrigbrechenden Material  $n_2$ .

Es gibt zwei grundlegende Arten bei der Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen in einem Lichtwellenleiter. Die erste Variante basiert auf dem Prinzip der internen Totalreflektion (ITR), welches in Abb. 4.18 dargestellt ist. Fällt eine Welle unter einem Winkel  $\gamma$  in einen Lichtwellenleiterkern mit dem Brechungsindex  $n_K$  ein, wird diese an der Grenzschicht zum Mantel, mit dem Brechungsindex  $n_M$ , total reflektiert.

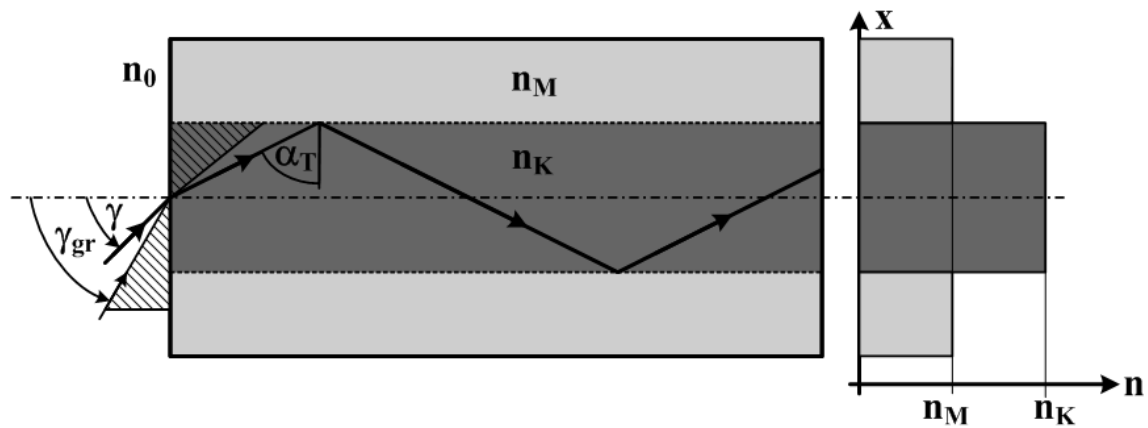


Abb. 4.18: Schematische Darstellung der Ausbreitung einer Welle in einer Stufenfaser mittels interner Totalreflektion und Darstellung des Brechungsindexprofils als Funktion des Ortes, wobei der Kern einen höheren Brechungsindex  $n_K$  besitzt als der Mantel  $n_M$ .

Die Energie breitet sich entlang des Kerns in  $z$ -Richtung aus. Dieser Effekt tritt für alle Einfallswinkel  $\gamma$ , die kleiner sind als der Akzeptanzwinkel  $\gamma_{gr}$ , auf.

$$\gamma_{gr} = \arcsin \left( \frac{\sqrt{n_K^2 - n_M^2}}{n_0} \right). \quad (4.79)$$

Für eine monomode Stufenfaser beträgt der Kerndurchmesser ca.  $9\mu\text{m}$  bei einem Manteldurchmesser von ca.  $120\mu\text{m}$ . Dabei besitzt der Kern einen höheren Brechungsindex als der Mantel. Eine weitere Möglichkeit, den Brechungsindex des Mantels zu senken, ist das Einbringen von Lochstrukturen. Diese photonischen Lichtwellenleiter (PCF – Photonic Fiber) ermöglichen eine höhere numerische Apertur und erlauben die Übertragung höherer Leistungen und/oder den Betrieb bei höheren Temperaturen. Die Variation der Mantelgeometrie (siehe Abb. 4.17 *Links*), wobei die periodische Struktur ein Vielfaches der Wellenlänge aufweist, erlaubt eine Anpassung des Übertragungsverhaltens.

Die zweite Variante von photonischen Lichtwellenleitern basiert auf dem im Abschnitt 4.2 beschriebenen photonischen Kristalleffekt. Bei den photonischen Bandlücken-Lichtwellenleitern liegen die periodischen Mantelstrukturen in der Größenordnung der Wellenlänge (siehe Abb. 4.17 *Rechts*). Die Ausbreitung der transversalen Moden wird durch die periodische Struktur gestoppt. Dies ermöglicht die Wellenausbreitung in einem Kern mit geringerem Brechungsindex als der Mantel. Die Analyse dieser Lichtwellenleiter wird im Abschnitt 5.1 beschrieben.

### 4.3.1 Transversale und Longitudinale Wellengleichung

Die Wellenausbreitung in einem optischen Leiter ist allgemein durch die Maxwell-Gleichungen gegeben, wobei das Profil des photonischen LWL als veränderlich über jeden beliebigen Raumpunkt  $\mathbf{r}(x,y)$  angenommen wird. Wellenleiter sind im Allgemeinen nicht magnetischer Natur mit einer relativen Permeabilität  $\mu_r=1$  und dem Brechungsindex  $n^2=\epsilon(\mathbf{r})$ . Die Maxwell-Gleichungen für ein verlustfreies und quellenfreies Gebiet im Frequenzraum lauten

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= j\omega n^2 \epsilon_0 \mathbf{E} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega \mu_0 \mathbf{H}\end{aligned}\quad (4.80)$$

Durch Rotationsbildung der Gl. (4.80) und unter Berücksichtigung der Vektoridentität  $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ , der Beziehung z.B. für das elektrische Feld  $\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\nabla \left[ \left( \nabla \ln(n^2) \right) \mathbf{E} \right] - \nabla^2 \mathbf{E}$  folgt

$$\begin{aligned}\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \mu n^2 \mathbf{E} + \left[ \nabla \ln(\mu) \times (\nabla \times \mathbf{E}) \right] + \nabla \left[ \nabla \left( \ln(n^2) \right) \mathbf{E} \right] &= 0 \\ \nabla^2 \mathbf{H} + \omega^2 \mu n^2 \mathbf{H} + \left[ \nabla \ln(n^2) \times (\nabla \times \mathbf{H}) \right] + \nabla \left[ \nabla \left( \ln(\mu) \right) \mathbf{H} \right] &= 0\end{aligned}\quad (4.81)$$

Der Term  $\nabla \left( \ln(n^2) \right)$  beschreibt die Polarisationsseigenschaften durch den Wellenleiter [69]. Für ein dielektrisches Medium mit  $\nabla \ln(\mu) = 0$  reduziert sich die Gl. (4.81) zu

$$\begin{aligned}\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \mu n^2 \mathbf{E} + \nabla \left[ \nabla \left( \ln(n^2) \right) \mathbf{E} \right] &= 0 \\ \nabla^2 \mathbf{H} + \omega^2 \mu n^2 \mathbf{H} + \left[ \nabla \ln(n^2) \times (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= 0\end{aligned}\quad (4.82)$$

Für den allgemeinen Fall eines invarianten Wellenleiters in z-Richtung, wie in Abb. 4.17 dargestellt, wird angenommen, dass das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  und das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  in Abhängigkeit von longitudinalen und transversalen Komponenten darstellbar sind

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= (\mathbf{v}_t + v_z \hat{\mathbf{e}}_z) e^{j\beta z} \\ \mathbf{H} &= (\mathbf{u}_t + u_z \hat{\mathbf{e}}_z) e^{j\beta z}\end{aligned}\quad (4.83)$$



Dabei sind  $v_z$ ,  $u_z$  die Feldkomponenten mit dem Einheitsvektor  $\hat{\mathbf{e}}_z$  in z-Richtung, mit den transversalen Komponenten für das elektrische Feld  $\mathbf{v}_t$  und das magnetische Feld  $\mathbf{u}_t$ . Die Rotation kann in longitudinalen und transversalen Komponenten dargestellt werden als [69, 70]

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{A})_t &= \nabla_t \times \mathbf{A}_z + \hat{\mathbf{e}}_z \times \frac{\partial \mathbf{A}_t}{\partial z} \\ (\nabla \times \mathbf{A})_z &= \nabla_t \times \mathbf{A}_t \end{aligned} \quad (4.84)$$

und der Nabla Operator durch

$$\nabla = \nabla_t + \hat{\mathbf{e}}_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.85)$$

Durch das Einsetzen der Gl. (4.83) in die Gl. (4.82) und das Anwenden der Gl. (4.84) und Gl. (4.85) folgt

$$\begin{aligned} \nabla_t^2 \mathbf{v}_t - \beta^2 v_z \hat{\mathbf{e}}_z + \omega^2 \mu n^2 (\mathbf{v}_t + v_z \hat{\mathbf{e}}_z) + \nabla \left[ \nabla (\ln(n^2)) (\mathbf{v}_t + v_z \hat{\mathbf{e}}_z) \right] &= 0 \\ \nabla_t^2 \mathbf{u}_t - \beta^2 u_z \hat{\mathbf{e}}_z + \omega^2 \mu n^2 (\mathbf{u}_t + u_z \hat{\mathbf{e}}_z) + \left[ \nabla \ln(n^2) \times (\nabla_t \times \mathbf{u}_t + j\beta \hat{\mathbf{e}}_z \times \mathbf{u}_t - \hat{\mathbf{e}}_z \times \nabla_t u_z) \right] &= 0 \end{aligned} \quad (4.86)$$

Das Sortieren nach longitudinalen und transversalen Feldkomponenten, mit  $k_0 = 2\pi/\lambda$  und der Wellenlänge im Vakuum  $\lambda$ , liefert

$$\begin{aligned} (\nabla_t^2 + n^2 k_0^2 - \beta^2) \mathbf{v}_t &= -\nabla_t (\mathbf{v}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2)) \\ (\nabla_t^2 + n^2 k_0^2 - \beta^2) \mathbf{u}_t &= (\nabla_t \times \mathbf{u}_t) \times \nabla_t \ln(n^2) \\ (\nabla_t^2 + n^2 k_0^2 - \beta^2) v_z &= -j\beta \mathbf{v}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \\ (\nabla_t^2 + n^2 k_0^2 - \beta^2) u_z &= (\nabla_t u_z - j\beta \mathbf{u}_t) \cdot \nabla_t \ln(n^2) \end{aligned} \quad (4.87)$$

Die Gleichungen zeigen, dass es ausreichend ist, die ersten beiden pur transversalen Wellengleichungen zu lösen. Die longitudinalen Feldkomponenten ergeben sich aus den transversalen Feldkomponenten.

### 4.3.2 Expansion mit trigonometrischen Funktionen

Für einen in xy-Richtung unendlich ausgedehnten periodischen Kristall, der invariant entlang der z-Achse ist, kann die verlustfreie dielektrische Funktion  $\epsilon(\mathbf{r})=n^2$  und der Logarithmus von  $n^2$  als eine Fourier-Reihe entwickelt werden (siehe Abschnitt 3.1).

$$\begin{aligned} n^2 &= \sum_{\zeta=-\infty}^{\infty} \eta(\mathbf{G}_{\zeta}) e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\zeta} \eta_{\mathbf{G}_{\zeta}} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \\ \ln(n^2) &= \sum_{\zeta=-\infty}^{\infty} \kappa(\mathbf{G}_{\zeta}) e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\zeta} \kappa_{\mathbf{G}_{\zeta}} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.88)$$

Dabei ist  $\mathbf{G}$  der reziproke Gittervektor über die 1. Brillouin-Zone. Die Nutzung des Bloch-Theorems, wonach die Lösung des Differenzialgleichungssystems eine beliebig periodische Funktion mit der Modulation des periodischen Gitters darstellt, folgt für die transversalen Feldkomponenten

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_t(\mathbf{r}) &= \sum_{\xi} \left[ E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_y \right] \\ \mathbf{u}_t(\mathbf{r}) &= \sum_{\xi} \left[ H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_y \right] \end{aligned} \quad (4.89)$$

mit  $H^x$ ,  $H^y$ ,  $E^x$ ,  $E^y$  den Fourier-Koeffizienten des  $\xi$ -ten Bloch-Eigenmodes der transversalen Felder. Die Wellengleichung Gl. (4.87) für das elektrische Feld  $\mathbf{v}_t$  ist

$$\nabla_t^2 \mathbf{v}_t + n^2 k_0^2 \mathbf{v}_t + \nabla_t \left( \mathbf{v}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \right) = \beta^2 \mathbf{v}_t. \quad (4.90)$$

Das Einsetzen der Gl. (4.89) und Gl. (4.88) für den periodischen Brechungsindex in Gl. (4.90) liefert für den ersten Term (siehe Anhang A.4.1.1)

$$\nabla_t^2 \mathbf{v}_t = - \sum_{\xi} |\mathbf{G}_{\xi}|^2 \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.91)$$

Der zweite Term nach den Substitutionen  $\mathbf{G}_\xi + \mathbf{G}_\gamma = \mathbf{G}_\gamma$ ,  $\eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} = \eta(\mathbf{G}_\xi - \mathbf{G}_\gamma)$  und dem Tauschen der Summationsgrenzen ergibt

$$n^2 k_0^2 \mathbf{v}_t = k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( E_{\mathbf{G}_\gamma}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_\gamma}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_\xi \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.92)$$

In analoger Weise folgt der dritte Term nach einigen Umformungen

$$\begin{aligned} \nabla_t \left[ \mathbf{E}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \right] &= \dots \\ &= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \left( G_{\xi}^x \hat{\mathbf{e}}_x + G_{\xi}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) \kappa_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left[ E_{\mathbf{G}_\gamma}^x \left( G_{\xi}^x - G_{\gamma}^x \right) + E_{\mathbf{G}_\gamma}^y \left( G_{\xi}^y - G_{\gamma}^y \right) \right] e^{j\mathbf{G}_\xi \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Sortieren der Komponenten nach den Feldkomponenten  $E^{x,y}$  und den Einheitsvektoren  $\hat{\mathbf{e}}_{x,y}$  liefert in Matrixform [71]

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m}_{11} & \mathbf{m}_{12} \\ \mathbf{m}_{21} & \mathbf{m}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^x \\ \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^y \end{pmatrix} = \beta^2 \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^x \\ \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^y \end{pmatrix}, \quad (4.94)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{11} &= k_0^2 \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} - |\mathbf{G}_\xi|^2 \mathbf{I} - \kappa_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_\xi^x - \mathbf{G}_\gamma^x \right) \mathbf{G}_\xi^x \\ \mathbf{m}_{12} &= -\kappa_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_\xi^x - \mathbf{G}_\gamma^x \right) \mathbf{G}_\xi^y \\ \mathbf{m}_{21} &= -\kappa_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_\xi^y - \mathbf{G}_\gamma^y \right) \mathbf{G}_\xi^x \\ \mathbf{m}_{22} &= k_0^2 \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} - |\mathbf{G}_\xi|^2 \mathbf{I} - \kappa_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_\xi^y - \mathbf{G}_\gamma^y \right) \mathbf{G}_\xi^y \end{aligned} \quad (4.95)$$

Gleichung (4.94) stellt ein  $4N_G \times 4N_G$  Eigenwertproblem dar, welches für eine feste Wellenlänge  $\lambda$  mit  $k_0 = 2\pi/\lambda$  gelöst wird. Dabei entspricht  $N_G$  der Anzahl der ebenen Wellen mit  $N_G = (2N+1)^2$  und  $N$  der Anzahl an Abtastpunkten der Fourier-Transformation der Basiszelle. Die Lösungen  $\beta$  der Eigenwertgleichung werden abfallend sortiert. Der effektive Brechungsindex der Mode, bei einer festen Frequenz, berechnet sich aus  $n_{\text{eff}} = \beta/k_0$ . Diejenigen Eigenwerte  $\beta$  mit den zugehörigen Eigenvektoren, die zwischen  $n_2 > \beta/k_0 > n_1$  liegen, sind physikalisch relevante Lösungen [72-74]. Eine Lösung für das transversale elektrische Feld bei unterschiedlichen Wellenlängen für einen hexagonalen Lichtwellenleiter ist in Abb. 4.19 dargestellt.

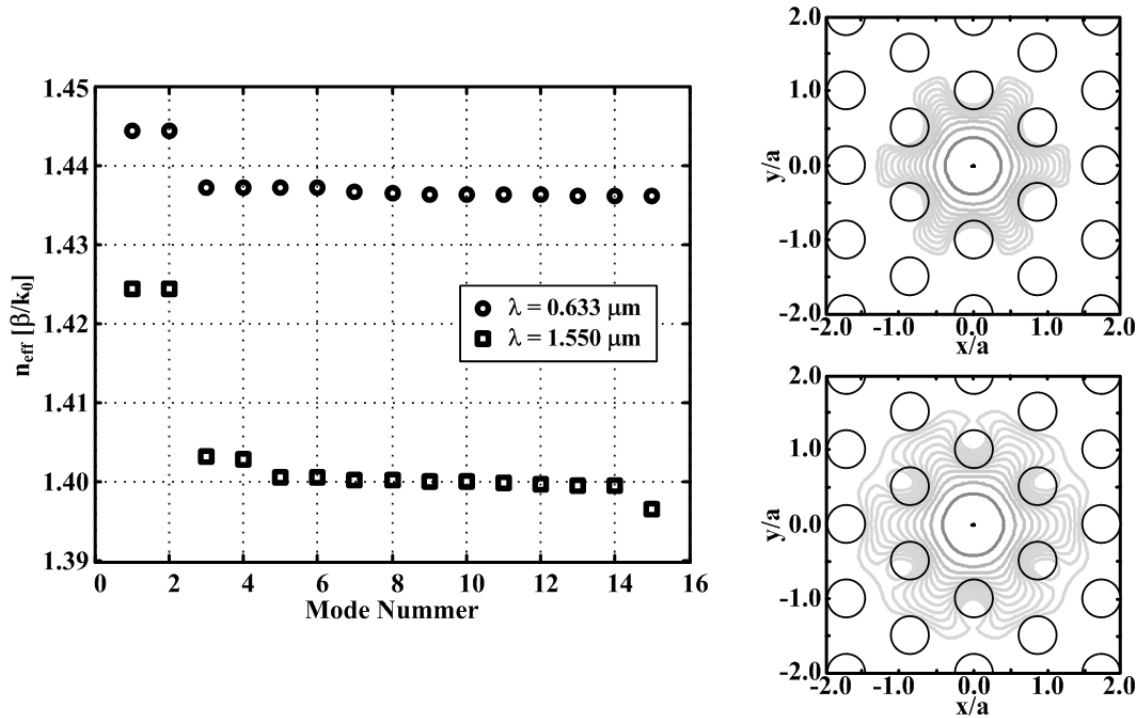


Abb. 4.19: Links: Eigenwerte  $n_{\text{eff}} = \beta/k_0$  abfallend sortiert. Rechts: Intensität des elektrischen Feldes  $|v_x|^2$  nach Gl. (4.89) in -5 dB Schritten bis -60 dB für ein hexagonales Gitter mit  $a = 2,3 \mu\text{m}$ ,  $R = 0,25a$ ,  $N = 20$ , berechnet für die Wellenlängen  $\lambda = 0,633 \mu\text{m}$  (Rechts oben) und  $\lambda = 1,55 \mu\text{m}$  (Rechts unten) nach Gl. (4.94).

Die ersten beiden Lösungen geben den Polarisationszustand des fundamentalen Modes an. Theoretisch besitzen beide für einen unendlich ausgedehnten Kristall einen identischen effektiven Brechungsindex  $n_{\text{eff}}$ . Der in den Berechnungen auftretende Unterschied ist ein Indikator für die Güte der Berechnung. Mit zunehmender Wellenlänge dehnt sich das Feld, wie bei einer normalen Stufenfaser, weiter in den Mantel aus (Abb. 4.19 Rechts).

Der Nachteil dieser Methode liegt in der Größe des zu lösenden Matrixproblems für jede Wellenlänge. Die Matrix ist proportional der Koeffizienten der Fourier-Transformation des Gitters. Da für eine exakte Approximation eine große Anzahl an Frequenzkomponenten benötigt wird, erhöhen sich die Rechenzeiten.

### 4.3.3 Hermite-Gauß-Expansion

Diese Variante erlaubt die Entkopplung der Berechnung des Eigenwertproblems von der Fourier-Transformation des periodischen Lichtwellenleiters. Für einen verlustfreien und entlang der z-Achse invarianten Lichtwellenleiter folgt für das modale elektrische Feld [72, 75, 76] mit der Ausbreitungskonstante des m-ten Bloch-Modes  $\beta^m$

$$\mathbf{E}^m(x, y, z) = \left[ \mathbf{v}_t^m(x, y) + v_z^m(x, y) \hat{\mathbf{e}}_z \right] e^{j\beta^m z}, \quad (4.96)$$

wobei sich das modale elektrische Feld für jede Mode aus einer transversalen Komponente  $\mathbf{v}_t^m = v_x^m \hat{\mathbf{e}}_x + v_y^m \hat{\mathbf{e}}_y$  und der longitudinalen Komponente  $v_z^m \hat{\mathbf{e}}_z$  zusammensetzt. Die Vektoren  $\hat{\mathbf{e}}$  sind die Einheitsvektoren entlang der Achsen. Eingesetzt in die Maxwell-Gleichungen ergeben sich die gekoppelten transversalen Feldkomponenten

$$\begin{aligned} (\nabla_t^2 - \beta^2 + k_0^2 n^2) \mathbf{e}_x &= -\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \mathbf{e}_y \right) \\ (\nabla_t^2 - \beta^2 + k_0^2 n^2) \mathbf{e}_y &= -\frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \mathbf{e}_y \right), \end{aligned} \quad (4.97)$$

mit der Wellenzahl  $k_0 = 2\pi/\lambda$  im Vakuum. Die Nummerierung der Moden wird im Folgenden für eine kompaktere Schreibweise vernachlässigt. Der periodische Brechungsindex mit der Defektstruktur lässt sich als Fourier-Transformation und einer Koordinatentransformation in einem rechtwinkligen Koordinatensystem darstellen [77-79].

$$n^2 = \sum_{\xi, \gamma=-P}^P \eta(G_{\xi, \gamma}) \cos(k_x x) \cos(k_y y), \quad (4.98)$$

mit  $2P+1$  Fourier-Komponenten und  $\eta(G_{\xi, \gamma})$  der Transformation des periodischen Gitters (siehe Anhang A.1).

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} f_R \varepsilon_2 + (1 - f_R) \varepsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2f_R (n_2^2 - n_1^2) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_1)}{|\mathbf{G}|R_1} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (4.99)$$

Im Gegensatz zu den in der Literatur vorgestellten Verfahren wird die photonische Kristallstruktur als *eine* Fourier-Transformation berechnet und nicht als Überlagerung des perfekten Kristalls mit einer Defektstruktur [75, 80, 81]. Dies erhöht die Konvergenz des Eigenwertproblems und die Berechnungsgeschwindigkeit. Der Verlauf

des Brechungsindex als Funktion des Ortes für eine hexagonale Superzelle (siehe Abschnitt 4.2.3) mit einem Defekt ist in Abb. 2.1 dargestellt.

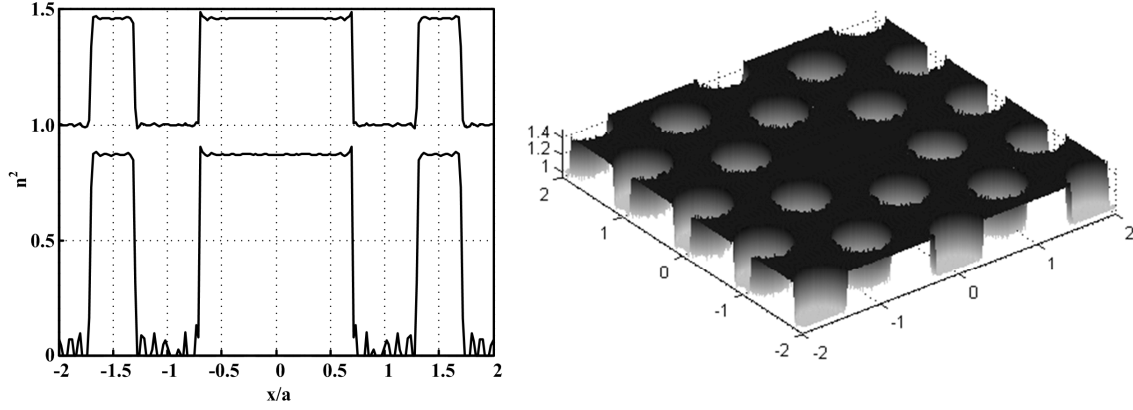


Abb. 4.20: Darstellung des Brechungsindex als Funktion des Ortes eines hexagonalen Lichtwellenleiters mit  $n_1=1,45$ ,  $n_2=1$ ,  $R=0,7a$  mit  $P=300$ .

Das modale Feld lässt sich über orthogonale normierte Hermite-Gauß  $\Psi_n(s)$  darstellen [73]

$$\begin{aligned} v_x(x, y) &= \sum_{a,b=0}^F E_{a,b}^x \Psi_a(x) \Psi_b(y) \\ v_y(x, y) &= \sum_{a,b=0}^F E_{a,b}^y \Psi_a(x) \Psi_b(y) \end{aligned} \quad (4.100)$$

mit  $(F+1)$  Termen. Die orthogonalen normierten Hermite-Gauß-Basisfunktionen  $\Psi_n(s)$  sind definiert nach [72, 79-82]

$$\Psi_n^s = \frac{2^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{n! \sigma_s \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{s^2}{2\sigma_s^2}} H_n\left(\frac{s}{\sigma_s}\right), \quad (4.101)$$

dabei sind  $H_n$  die Hermite-Funktionen n-ten Grades mit der charakteristischen Breite  $\sigma_s$  der Basisfunktionen. In Bezug auf die Gitterkonstante  $a$  wird die Breite mit  $\sigma_s = a/2$  festgelegt [72]. Einsetzen der Gl. (4.100) in Gl. (4.97) und Integration über die gesamte transversale Ebene liefert das gekoppelte Eigenwertproblem

$$\begin{bmatrix} I_{a,b,c,d}^{(1)} + k_0^2 I_{a,b,c,d}^{(2)} + I_{a,b,c,d}^{(3),x} & I_{a,b,c,d}^{(4),x} \\ I_{a,b,c,d}^{(4),y} & I_{a,b,c,d}^{(1)} + k_0^2 I_{a,b,c,d}^{(2)} + I_{a,b,c,d}^{(3),y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} = \beta^2 \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix}, \quad (4.102)$$

$$\mathbf{M} \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} = \beta^2 \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix}$$

mit den Integralen

$$\begin{aligned} I_{a,b,c,d}^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^x \Psi_b^y \nabla_t^2 [\Psi_c^x \Psi_d^y] dx dy \\ I_{a,b,c,d}^{(2)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n^2 \Psi_a^x \Psi_b^y \Psi_c^x \Psi_d^y dx dy \\ I_{a,b,c,d}^{(3),x} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^x \Psi_b^y \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \Psi_c^x \Psi_d^y \right] dx dy \\ I_{a,b,c,d}^{(3),y} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^x \Psi_b^y \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \Psi_c^x \Psi_d^y \right] dx dy \\ I_{a,b,c,d}^{(4),x} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^x \Psi_b^y \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \Psi_c^x \Psi_d^y \right] dx dy \\ I_{a,b,c,d}^{(4),y} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_a^x \Psi_b^y \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \Psi_c^x \Psi_d^y \right] dx dy \end{aligned} \quad (4.103)$$

Der Vorteil der Expansion mittels der Hermite-Gauß-Funktionen ist die analytische Lösung der Integrale Gl. (4.103). Mit Hilfe der Orthogonalitätsbedingung folgt für die einzelnen Integrale (siehe Anhang A.4.2.1)

$$\begin{aligned} I_{a,b,c,d}^{(1)} &= -\frac{2a+2b+1}{\sigma^2} \delta_{a,c} \delta_{b,d} + \frac{\sqrt{a(a-1)}}{2\sigma^2} \delta_{a,c-2} \delta_{b,d} + \dots \\ &\quad \frac{\sqrt{(a+1)(a+2)}}{2\sigma^2} \delta_{a,c+2} \delta_{b,d} + \frac{\sqrt{b(b-1)}}{2\sigma^2} \delta_{a,c} \delta_{b,d-2} + \frac{\sqrt{(b+1)(b+2)}}{2\sigma^2} \delta_{a,c} \delta_{b,d+2} \end{aligned} \quad (4.104)$$

und

$$\begin{aligned}
I_{a,b,c,d}^{(2)} &= \sum_{f,g=0}^{P-1} \eta_{f,g} I_{f,a,c}^{(21),x} I_{g,b,d}^{(21),y} \\
I_{a,b,c,d}^{(3),x} &= \sum_{f,g=0}^{P-1} \eta_{f,g}^{\text{ln}} I_{f,a,c}^{(31),x} I_{g,b,d}^{(21),y} \\
I_{a,b,c,d}^{(3),y} &= \sum_{f,g=0}^{P-1} \eta_{f,g}^{\text{ln}} I_{f,a,c}^{(21),x} I_{g,b,d}^{(31),y} , \\
I_{a,b,c,d}^{(4),x} &= \sum_{f,g=0}^{P-1} \eta_{f,g}^{\text{ln}} I_{f,a,c}^{(41),x} I_{g,b,d}^{(42),y} \\
I_{a,b,c,d}^{(4),y} &= \sum_{f,g=0}^{P-1} \eta_{f,g}^{\text{ln}} I_{f,a,c}^{(42),x} I_{g,b,d}^{(41),y}
\end{aligned} \tag{4.105}$$

mit  $\sigma = \sigma_x = \sigma_y$  und den Basisintegralen (analytische Lösungen, siehe Anhang A.4.2.1)

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(21),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right) \Psi_m^s \Psi_q^s ds \\
I_{n,m,q}^{(31),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right)}{\partial s} \frac{\partial \Psi_m^s}{\partial s} \Psi_q^s ds \\
I_{n,m,q}^{(41),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right)}{\partial s} \Psi_m^s \Psi_q^s ds , \\
I_{n,m,q}^{(42),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \left[ \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right) \Psi_q^s \right]}{\partial s} \Psi_m^s ds
\end{aligned} \tag{4.106}$$

folgt für  $\mathbf{M}$  ein  $2F^2 \times 2F^2$  großes Eigenwertproblem. Mit den  $2 \times F^2$  Eigenwerten  $\beta^2$  und den zugehörigen Eigenvektoren  $E^x, E^y$ .

$$\mathbf{M} \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} = \beta^2 \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} \tag{4.107}$$

Dabei ist die Lösung nicht von der Größe  $P$  der Fourier-Transformation der periodischen dielektrischen Funktion  $\eta$  abhängig. Die Lösung der Gl. (4.107) für eine feste Wellenlänge  $\lambda$  liefert eine Fülle an möglichen Lösungen. Physikalisch relevante



Lösungen liegen zwischen  $n_M < \beta/k < n_1$ . Dabei ist  $n_M$  der effektive Brechungsindex des Mantels und  $n_1$  der Brechungsindex des Grundmaterials ( $\text{SiO}_2$ ). Die Lösungen für einen hexagonalen photonischen Lichtwellenleiter ist in Abb. 4.21 dargestellt.

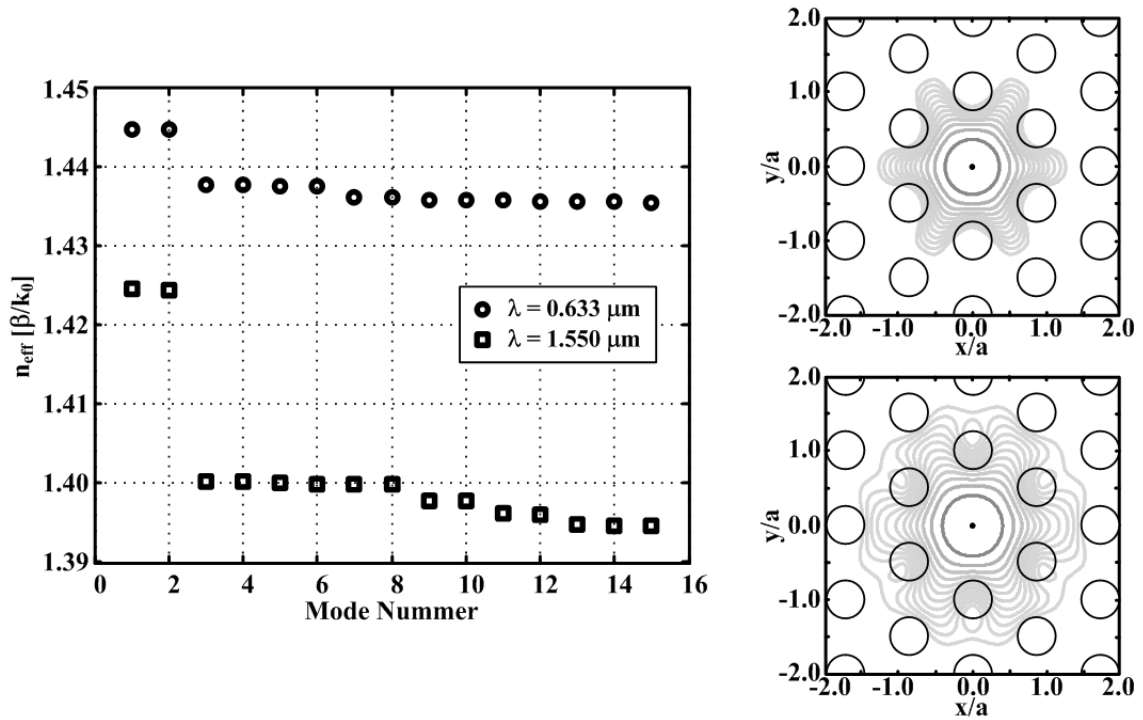


Abb. 4.21: *Links*: Eigenwerte  $n_{\text{eff}} = \beta/k_0$  abfallend sortiert. *Rechts*: Intensität des elektrischen Feldes  $|v_x|^2$  nach Gl. (4.89) in -5 dB Schritten bis -60 dB für ein hexagonales Gitter mit  $a = 2,3 \mu\text{m}$ ,  $R = 0,25a$  berechnet für die Wellenlängen  $\lambda = 0,633 \mu\text{m}$  (*Rechts oben*) und  $\lambda = 1,55 \mu\text{m}$  (*Rechts unten*) nach Gl. (4.94) mit  $F = 16$ ,  $P = 500$ .

Die Entkopplung der Fourier-Transformation von der Berechnung der Moden ermöglicht eine effiziente Lösung des Feldproblems. Das zu lösende Eigenwertproblem reduziert sich auf eine  $2F^2 \times 2F^2$  Matrix. Ein weiterer Vorteil dieser Berechnung ist die analytische Lösung der Integrale und Integralbeziehungen, wie der Berechnung der Dispersion, der effektiven Modenfläche oder Verluste [77].

#### 4.3.4 Opposite-parity

Das Eigenwertproblem der vektoriellen Maxwell-Gleichungen Gl. (4.107) wird über die Symmetrieeigenschaften reduziert [78, 83]. Diese Eigenschaft wird anhand des transversalen modalen elektrischen Feldes  $\mathbf{v}$  Gl. (4.97) gezeigt

$$(\nabla_t^2 - \beta^2 + k_0^2 \epsilon) \mathbf{v}_x(x, y) = -\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \ln(\epsilon)}{\partial x} \mathbf{v}_x(x, y) + \frac{\partial \ln(\epsilon)}{\partial y} \mathbf{v}_y(x, y) \right). \quad (4.108)$$

Unter der Annahme, dass der periodische Brechungsindex  $n(x,y)$  eine gerade Funktion der  $x$ - und  $y$ -Achse mit  $n(x,y)=n(-x,y)$  und  $n(x,y)=n(x,-y)$  ist, folgt nach Substitution von  $s=-x$

$$\left(\nabla_t^2 - \beta^2 + k_0^2 \varepsilon\right) v_x(-s, y) = -\frac{\partial}{\partial(-s)} \left( \frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial(-s)} v_x(-s, y) + \frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial y} v_y(-s, y) \right). \quad (4.109)$$

Der Laplace Operator ist abhängig von der  $y$ - und  $s$ -Achse, und unter der Annahme, dass das elektrische Modale Feld  $v_x$  eine gerade Funktion zur  $x$ -Achse darstellt  $v_x(x,y)=v_x(-x,y)$ , wird

$$\left(\nabla_t^2 - \beta^2 + k_0^2 \varepsilon\right) v_x(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial x} v_x(x, y) + \frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial y} v_y(-x, y) \right). \quad (4.110)$$

Der Vergleich von Gl. (4.108) und Gl. (4.110) liefert

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial y} v_y(-x, y) = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \ln(\varepsilon)}{\partial y} v_y(x, y). \quad (4.111)$$

Es folgt, wenn  $v_x$  eine gerade Funktion ist, muss  $v_y$  eine ungerade Funktion der  $x$ -Achse sein, denn es gilt

$$-v_y(-x, y) = v_y(x, y). \quad (4.112)$$

Für ähnliche Annahmen, in denen alle Komponenten überprüft werden, folgt, dass  $v_x$  und  $v_y$  immer die gegenteilige Symmetrie verkörpern. Ist  $v_x$  gerade, wird  $v_y$  ungerade und somit das Integral von minus unendlich bis plus unendlich gleich Null. Diese Eigenschaft wird ausgenutzt, um eine kompaktere Matrixschreibweise zu erreichen. Eine gerade oder ungerade Hermite-Gauß-Funktion  $\Psi$  lässt sich darstellen mit dem Index  $2a+m$ , wobei  $m$  eine Boolesche Zahl mit  $m=0$  oder  $\bar{m}=1$  entspricht. Unter der Verwendung der Booleschen Algebra und der Symmetriebedingung folgt für das modale Feld

$$\begin{aligned}
v_x(x, y)_{mn} &= \sum_{a,b=0}^F E_{a,b}^x \Psi_{2a+m}(x) \Psi_{2b+n}(y) \\
v_y(x, y)_{\bar{m}\bar{n}} &= \sum_{a,b=0}^F E_{a,b}^y \Psi_{2a+\bar{m}}(x) \Psi_{2b+\bar{n}}(y)
\end{aligned} \quad (4.113)$$

dabei ist  $v_x$  eine gerade und  $v_y$  eine ungerade Funktion. Eingesetzt in die transversale Wellengleichung und die Integration liefert das Eigenwertproblem

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \left[ I_{a,b,c,d}^{(1)} + k_0^2 I_{a,b,c,d}^{(2)} + I_{a,b,c,d}^{(3),x} \right]_{mn} & \left[ I_{a,b,c,d}^{(4),x} \right]_{mn} \\ \left[ I_{a,b,c,d}^{(4),y} \right]_{\bar{m}\bar{n}} & \left[ I_{a,b,c,d}^{(1)} + k_0^2 I_{a,b,c,d}^{(2)} + I_{a,b,c,d}^{(3),y} \right]_{\bar{m}\bar{n}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} &= \beta^2 \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} \\
\mathbf{M}_{mn} \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix} &= \beta^2 \begin{bmatrix} E^x \\ E^y \end{bmatrix}
\end{aligned} \quad (4.114)$$

mit den zugehörigen Integralen

$$\begin{aligned}
\left[ I_{a,b,c,d}^{(1)} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \nabla_t^2 \left[ \Psi_{2c+m}^x \Psi_{2d+n}^y \right] dx dy \\
\left[ I_{a,b,c,d}^{(2)} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n^2 \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \Psi_{2c+m}^x \Psi_{2d+n}^y dx dy \\
\left[ I_{a,b,c,d}^{(3),x} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \Psi_{2c+m}^x \Psi_{2d+n}^y \right] dx dy \\
\left[ I_{a,b,c,d}^{(3),y} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \Psi_{2c+m}^x \Psi_{2d+n}^y \right] dx dy \\
\left[ I_{a,b,c,d}^{(4),x} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial y} \Psi_{2c+\bar{m}}^x \Psi_{2d+\bar{n}}^y \right] dx dy \\
\left[ I_{a,b,c,d}^{(4),y} \right]_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2a+m}^x \Psi_{2b+n}^y \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \ln(n^2)}{\partial x} \Psi_{2c+\bar{m}}^x \Psi_{2d+\bar{n}}^y \right] dx dy
\end{aligned} \quad (4.115)$$

Die Integrale sind analytisch, wie im Anhang A.4.2.1 beschrieben, zu lösen. Mittels der Reduktion und Indizierung  $\mathbf{M}_{mn}$  ergibt sich ein  $(2F^2) \times (2F^2)$  Eigenwertproblem mit  $2F^2$  Eigenwerten, die mit  $\beta$  korrespondieren. Die Eigenwertgleichung Gl. (4.114) wurde unter der Bedingung hergeleitet, dass  $v_x$  eine gerade Funktion der x-Achse ist. Es

ergeben sich für die allgemeine Lösung des Feldproblems 4 Möglichkeiten, die die Booleschen Indizes  $m, n$  unabhängig voneinander annehmen können. Somit ergibt sich ein  $4((2F^2) \times (2F^2))$  großes Eigenwertproblem. Im Vergleich zu dem Eigenwertproblem, ohne Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften Gl. (4.107), werden  $2F$  Terme benötigt für  $4 \cdot 2F$  Eigenwerte, und somit besteht die Matrix aus  $(2(2F)^2) \times (2(2F)^2)$  Werten. Die Größe der Eigenwertmatrix verringert sich somit unter den Symmetrieeigenschaften um den Faktor  $4 \cdot 4 = 16$ .

Es ist zu beachten, dass die Reduktion unter der Annahme der Symmetrie vollzogen wurde. Diese Aussage ist in nahezu allen Fällen wahr, denn mittels einer Koordinatentransformation kann das Gitter in eine solche Form überführt werden. Bei photonischen Lichtwellenleitern, die nicht in eine solche Form überführt werden können, wird das transversale modale elektrische Feld nach Gl. (4.107) ermittelt. Im weiteren Verlauf werden alle photonischen Lichtwellenleiter über die Hermite-Gauß-Funktionen nach Gl. (4.114) berechnet.

### 4.3.5 Dispersion

Bei der Übertragung von elektromagnetischen Wellen durch einen Wellenleiter kommt es zu Verzerrungen des Signals. Diese Verzerrungen können so dominant werden, dass ein Empfänger nicht mehr in der Lage ist, eine Information zu detektieren. Eine Ursache dafür sind Laufzeitverzerrungen, die durch den von Wellenlängen abhängigen Brechungsindex  $n(\lambda)$  auftreten. Ideal ist eine Welle monochromatisch. In realen Übertragungssystemen besteht die elektromagnetische Welle aus einem Spektrum endlicher Breite. Die Fourier-Transformation des Eingangssignals besteht aus mehreren Fourier-Komponenten unterschiedlicher Frequenzen, welche mit einer unterschiedlichen Laufzeit durch den Lichtwellenleiter zum Ausdruck kommt. Die Frequenz oder Wellenlängenabhängigkeit des Materials aus dem die Faser besteht wird Materialdispersion  $D_m$  genannt. Weitere Laufzeitverzögerungen der einzelnen Frequenzen können durch die Geometrie des Wellenleiters auftreten, die so genannte Wellenleiterdispersion  $D_w$ .

#### 4.3.5.1 Materialdispersion

Der Verlauf des Brechungsindex über die Wellenlänge ist in Abb. 4.22 dargestellt. Die Absorptionsbanden bei 100nm, die durch Elektronenschwingungen und Molekularschwingungen bei ca. 10µm hervorgerufen werden, liegen außerhalb des Operationsbereichs des Lichtwellenleiters. Weiterhin existieren die Fraunhofer'sche D-Linie des Natriums bei  $\lambda = 589,30\text{nm}$ , die F-Linie und C-Linie des Wasserstoff bei einer Wellenlänge von 486,13nm und  $\lambda = 656,27\text{nm}$  [84]. Eine häufig verwendete empirische Interpolation des Brechungsindex  $n(\omega)$  als Funktion der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  ist durch die Sellmeier-Gleichung gegeben [84, 85]

$$n^2(\omega) = 1 + \sum_{i=1}^3 \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_i^2}, \quad (4.116)$$

mit den Koeffizienten für Quarzglas  $A_1=0,6961663$ ,  $A_2=0,4079426$  und  $A_3=0,8974794$  bei den zugehörigen Wellenlängen  $\lambda_1=0,0684043\mu\text{m}$ ,  $\lambda_2=0,1162414\mu\text{m}$  und  $\lambda_3=9,896161\mu\text{m}$  [86]. Die Materialdispersion als Funktion der Wellenlänge mit  $n=n(\omega)$  ist [79, 85]

$$D_m = -\frac{\lambda}{c} \frac{d^2 n}{d\lambda^2} \quad (4.117)$$

und für Quarzglas in Abb. 4.22 dargestellt.

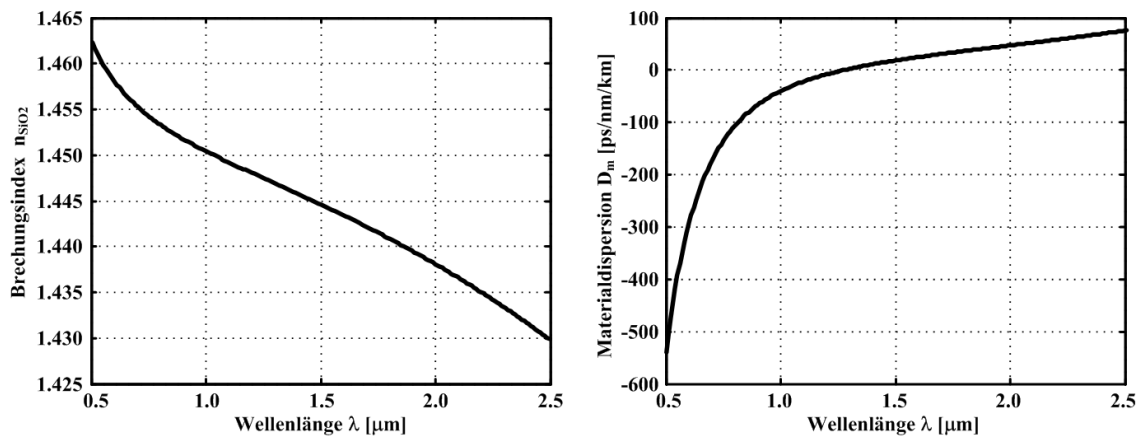


Abb. 4.22: *Links*: Brechungsindex als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  nach [86]. *Rechts*: Materialdispersion  $D_m$  von Quarzglas -  $\text{SiO}_2$  - nach Gl. (4.117).

Der frequenzabhängige Brechungsindex und daraus folgend die Dispersion sind je nach Dotierung des Glases unterschiedlich. Diese Eigenschaft des Glases ist nur bedingt und im geringen Maße veränderbar. Eine weitere dominante Dispersionsform ist die Wellenleiterdispersion.

#### 4.3.5.2 Wellenleiterdispersion

Die Geometrie des Wellenleiters und die der Mantelstruktur bestimmen das Übertragungsverhalten des Systems. Die Lösung der Eigenwertgleichung Gl. (4.114) in Abhängigkeit der Wellenlänge liefert einen effektiven Brechungsindex  $n_{\text{eff}}(\omega)$  der unterschiedlichen Moden (siehe Abb. 4.21).

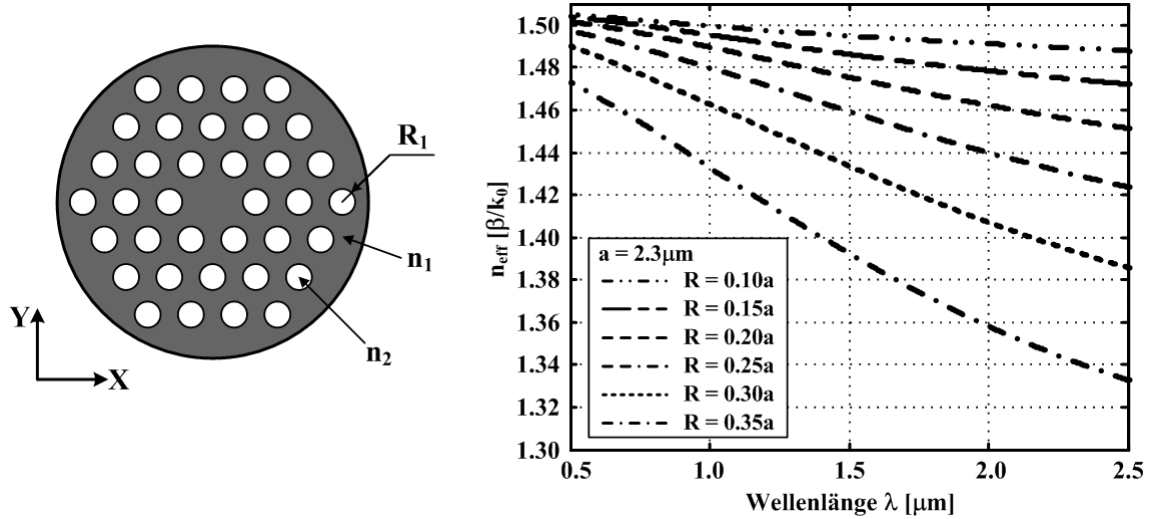


Abb. 4.23: *Links:* Schematische Darstellung eines hexagonalen photonischen Lichtwellenleiters bestehend aus Glas ( $n_1$ ) und Löchern (Luft  $n_2=1$ ). Die Wellenleiterstruktur entsteht durch Ausfüllen des zentralen Lochs mit Glas ( $n_1$ ). *Rechts:* Effektiver Brechungsindex  $n_{\text{eff}}$  des fundamentalen x-polarisierten Mode als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  und des normierten Radius  $R/a$  für ein hexagonales Gitter mit der Gitterkonstante  $a=2,3\mu\text{m}$  nach Gl. (4.114).

Wie in Abb. 4.23 dargestellt, ist der effektive Brechungsindex  $n_{\text{eff}}$  eine Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  und des normierten Radius  $R/a$ . Die Dispersion  $D_w$  des Wellenleiters in Abhängigkeit der Geometrie ist [87]

$$D_w = -\frac{\lambda}{c} \frac{d^2 n_{\text{eff}}}{d\lambda^2}, \quad (4.118)$$

mit der Eigenschaft der Skalierung der Maxwell-Gleichungen folgt für die Dispersion [75, 87, 88]

$$D_w(\lambda, Ma, f_Q) = \frac{1}{M} D_w\left(\frac{\lambda}{M}, a, f_Q\right), \quad (4.119)$$

wobei  $M$  ein Skalierungsfaktor ist. Die Berechnung der Wellenleiterdispersion ist in Abb. 4.24 dargestellt.

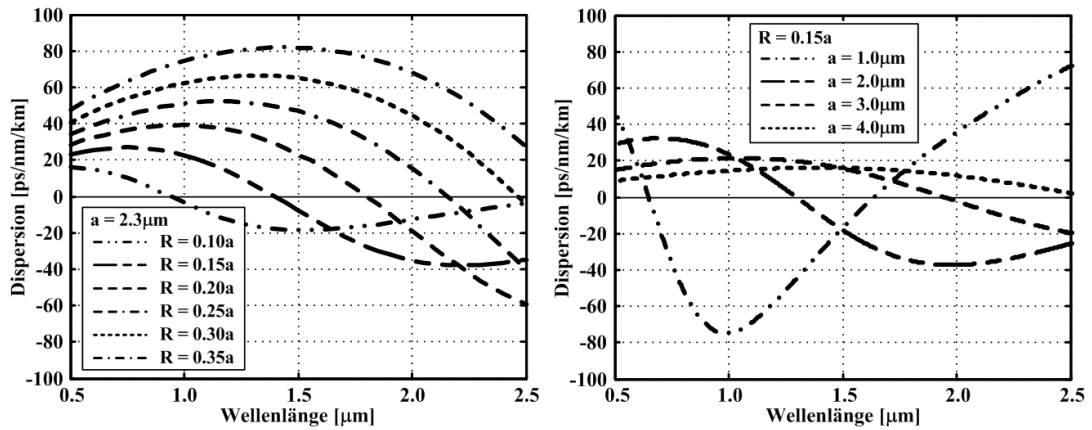


Abb. 4.24: Wellenleiterdispersion des x-polarisierten Mode als Funktion *Links*: des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts*: der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Das Verhalten der Dispersion lässt sich über den normierten Radius  $R/a$  und die Gitterkonstanten einstellen [87-90]. Bei zunehmender Wellenlänge ergibt sich in den meisten Fällen eine negative Dispersion, die der Materialdispersion entgegenvirkt.

#### 4.3.5.3 Gesamtdispersion

Die gesamte Dispersion  $D$  des Wellenleiters ergibt sich aus der Addition der Wellenleiterdispersion  $D_w$  und der chromatischen Dispersion  $D_m$  des Materials [87]

$$D(\lambda) = D_m(\lambda) + D_w(\lambda). \quad (4.120)$$

Die Berechnung der gesamten Dispersion für einen hexagonalen photonischen Lichtwellenleiter ist in Abb. 4.25, für  $n_1=1,45$ ,  $n_2=1$  für unterschiedlich normierte Radien dargestellt.

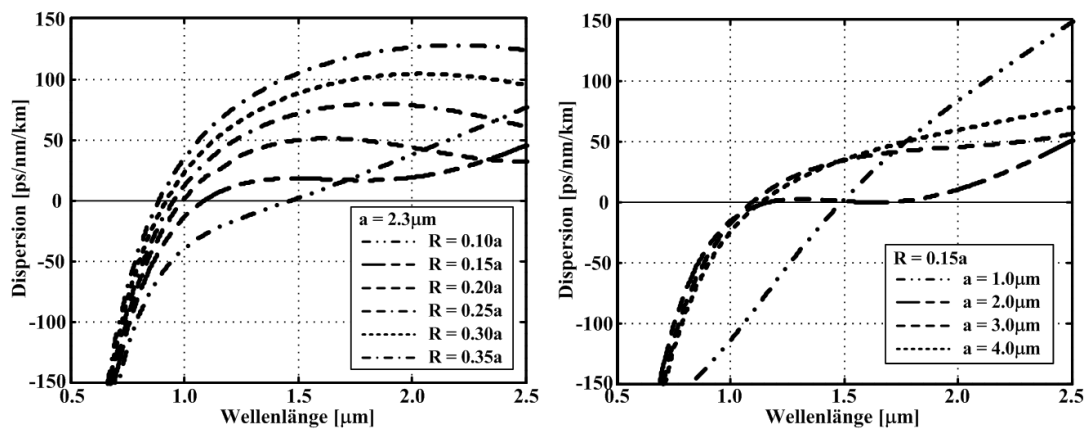


Abb. 4.25: Wellenleiterdispersion plus Materialdispersion des x-polarisierten Mode als Funktion *Links*: des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts*: der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Mit abnehmenden  $R/a$  verringert sich der Einfluss der Wellenleiterdispersion  $D_w$ , und die Materialdispersion  $D_m$  wird dominant. Durch eine geeignete Wahl der Geometrieparameter ist es möglich, einen photonischen Lichtwellenleiter herzustellen, der eine sehr geringe Dispersion, nahezu Null, über einen weiten Bereich im Infraroten besitzt. Wie in Abb. 4.25 entsteht eine ultra flache Dispersion von einer Wellenlänge  $\lambda$  von  $1,1\mu\text{m}$  bis  $1,9\mu\text{m}$  bei einer Gitterkonstanten von  $2\mu\text{m}$  mit einem Radius von  $0,3\mu\text{m}$ .

#### 4.3.6 V-Parameter

In herkömmlichen Stufenfasern beschreibt der V-Parameter, oder auch normalisierter Frequenz Parameter, einen Wert, der angibt, wie viele Moden in dem Lichtwellenleiter ausbreitungsfähig sind. Für einen Werte  $V$  kleiner 2,405 ist die Stufenfaser monomode. Diese stellt die erste Nullstelle der Bessel-Funktion nullter Ordnung  $J_0$  dar. Die Bessel-Funktionen lösen das Differenzialgleichungssystem der Maxwell-Gleichungen für ein kreissymmetrisches System. Der V-Parameter ergibt sich in Abhängigkeit der Wellenlänge  $\lambda$  [69]

$$V(\lambda) = 2\pi \frac{a}{\lambda} \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_M^2} . \quad (4.121)$$

Dabei ist  $n_{\text{eff}}$  der effektive Brechungsindex des fundamentalen Modes mit der Gitterkonstanten  $a$  wie in Abb. 4.23 dargestellt. Der Brechungsindex des „Mantels“, oder der periodischen Gitterstruktur folgt analog zu  $n_{\text{eff}}$  aus Gl. (4.114). Dabei wird die Eigenwertgleichung für ein perfektes Gitter ohne Defektstruktur berechnet. Im Gegensatz zu den Stufenfasern liegt die „Cut-off“ Bedingung bei  $\pi$  [91, 92].

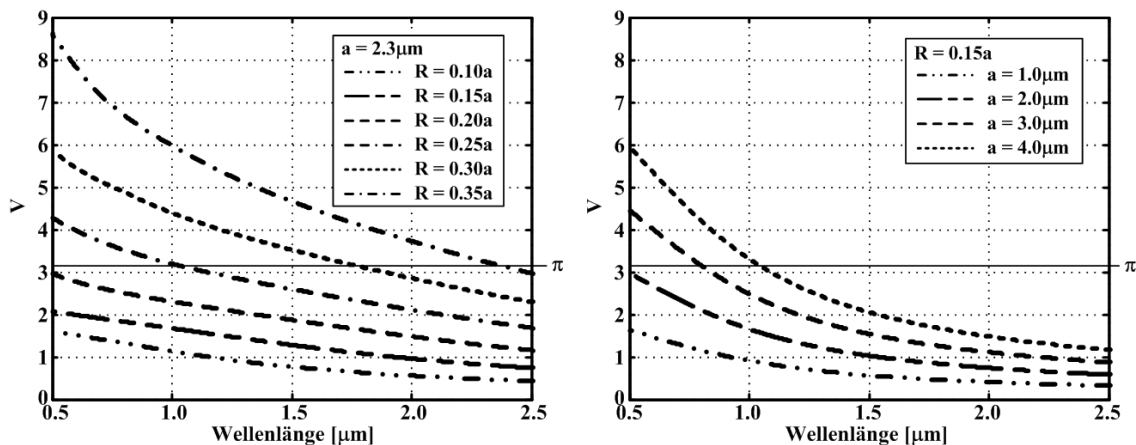


Abb. 4.26: V-Parameter des x-polarisierten Mode als Funktion *Links:* des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts:* der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1.45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).



Eine hexagonale Faser mit einer Gitterkonstanten von  $a=2,3\mu\text{m}$  und einem  $R=0,25a$  ist monomode für alle Wellenlängen  $\lambda$  größer  $1\mu\text{m}$ .

#### 4.3.7 Effektive Fläche

Eine einfache Abschätzung von nichtlinearen Effekten bei der Wellenausbreitung ist über die effektive Fläche möglich. Dabei wird eine hohe Energiedichte benötigt, damit nichtlineare Effekte signifikant werden [93, 94]. Die effektive Fläche eines Modes ist gegeben durch [69]

$$A_{\text{eff}} = \frac{\left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^2 dx dy \right)^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^4 dx dy} . \quad (4.122)$$

Die Integration für die Hermite-Gauß-Funktionen (siehe Anhang A.4.2.2) liefert die exakte und analytische Lösung. Die Berechnung der effektiven Fläche  $A_{\text{eff}}$  ist in Abb. 4.27 dargestellt für ein hexagonales Gitter mit  $R_{\text{Def}}=0$  (siehe Abb. 4.19).

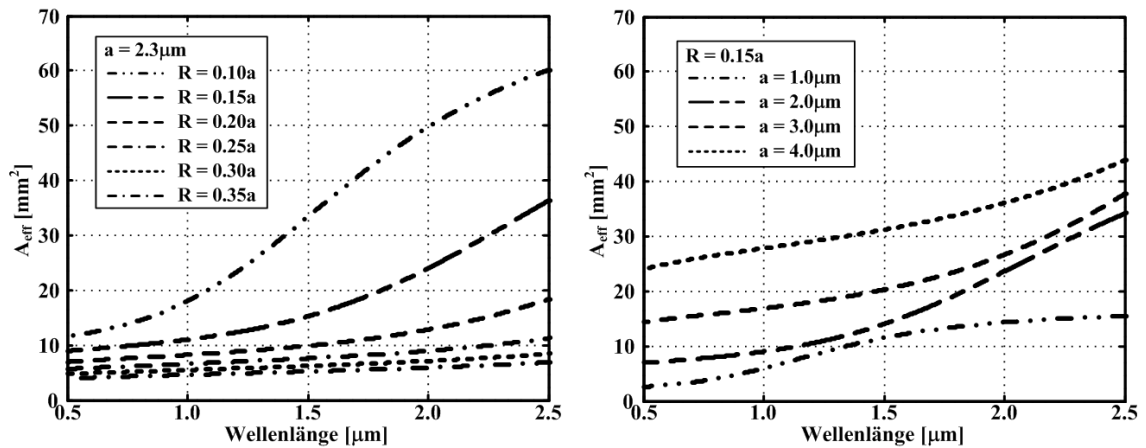


Abb. 4.27: Effektive Fläche des x-polarisierten Modes als Funktion Links: des normierten Radius  $R/a$ , Rechts: der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Die effektive Fläche ist wie die Dispersion, der V-Parameter, die Nichtlinearitäten, die Verluste und das Übertragungsverhalten des Wellenleiters maßgeblich von der Geometrie und dem Design des Wellenleiters abhängig. Ein weiterer, nicht zu vernachlässigender Einfluss ergibt sich aus herstellungsbedingten Fluktuationen.



## 5 Reale Kapillarlichtwellenleiter

Der Herstellungsprozess von Glasfasern oder photonischen Lichtwellenleitern erfolgt meist in zwei grundlegenden Schritten. Der erste besteht in der Herstellung der Preformen (Rohlinge), die z.B. durch OVD (outside vapor deposition, Corning Glass Works), MCVD (modified chemical vapor decomposition, Bell Laboratories 1974) oder PCVD (plasma chemical vapor decomposition) hergestellt werden [84].

Der zweite Schritt definiert das Design und die Größenverhältnisse des photonischen Lichtwellenleiters. Dabei werden die Preformen zu einem dicht gepackten Bündel „gestapelt“ (eng. stack) und in einem Ofen, mit einer definierten Heizzone und Temperaturprofil, verzogen (eng. draw). Der „stack-and-draw“ Prozess ist in Abb. 5.1 schematisch dargestellt. Dieser wird für die Herstellung der meisten heutigen photonischen Kristallfasern eingesetzt [12, 14, 95-98]. Das Verziehen des Bündels aus Preformen erfolgt bei einer Temperatur, die im Viskositätsbereich des zu verwendeten Glases liegt. Dabei bestimmt die Geometrie der Preformen und das Verhältnis aus Zustellgeschwindigkeit  $v_1$  und Abzugsgeschwindigkeit  $v_2$  die Endgeometrie des Ziehlings ( $v_1 < v_2$ ).

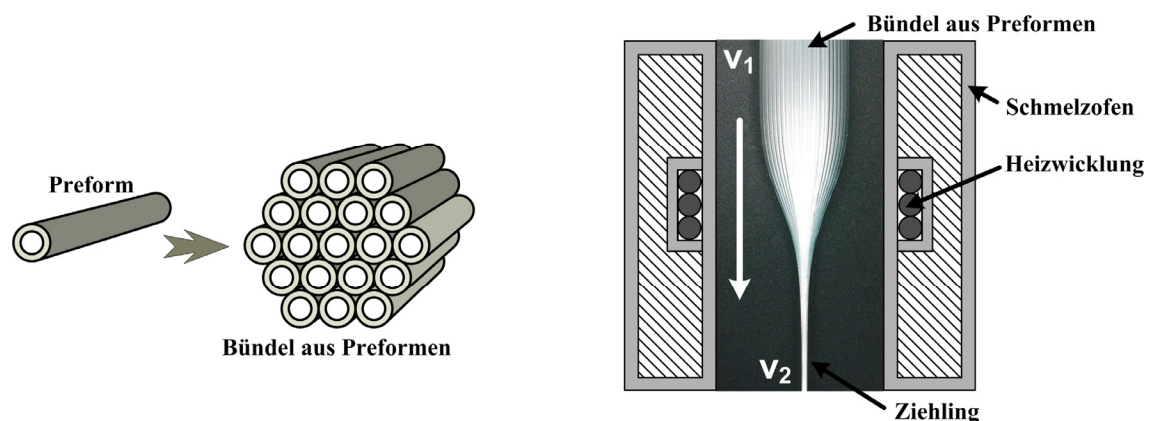


Abb. 5.1: Schematische Darstellung der Herstellung eines photonischen Lichtwellenleiter. *Links:* Erzeugen einer dichten Packung aus Preformen. *Rechts:* Verziehen des realen Bündels mit  $v_1 < v_2$  in der Heizzone. (Bild der Ziehzwiebel - TU-Ilmenau, Fachgebiet Glas- und Keramiktechnologie um Frau Prof. D. Hülsenberg, hergestellt durch Dipl. Ing. S. Belau).

Die Endgeometrie des Ziehlings wird weiterhin durch den Temperaturverlauf in der Heizzone und die Druckverhältnisse beim Verziehen beeinflusst. Bei einem Gegendruck in den Kapillaren ist eine Aufweitung des Kapillardurchmessers und

Verringerung der Wandstärke möglich (siehe Abb. 5.2), und unter Normaldruck können durch die Oberflächenspannung die Kapillaren kollabieren.

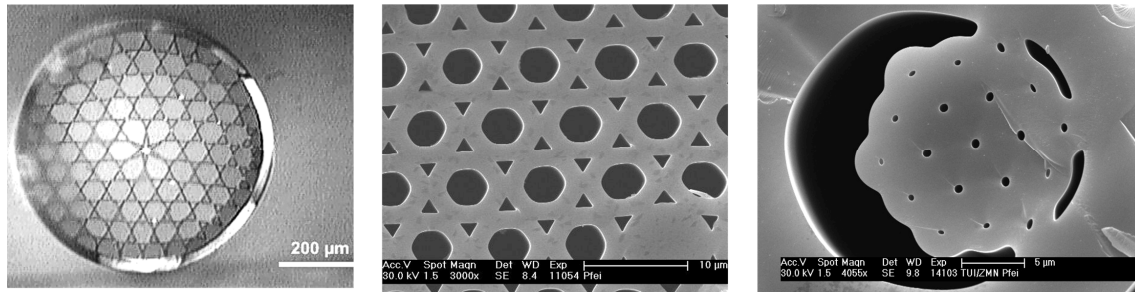


Abb. 5.2: Elektronenstrahlmikroskop (REM) Aufnahmen von verzogenen Glasbündeln mit unterschiedlichen Prozessparametern. (REM Bild - TU-Ilmenau, Fachgebiet Glas- und Keramiktechnologie um Frau Prof. D. Hülsenberg, hergestellt durch Dipl. Ing. S. Belau)

Durch das Stapeln zylindrischer Preformen kommt es zu zusätzlichen Lufteinschlüssen in der periodischen Struktur. Diese werden im Weiteren als Taschen bezeichnet. Die Taschen sind nach dem Verziehprozess existent [14, 81, 95], wie in Abb. 5.2 *Mitte* und in Abb. 5.3 gezeigt.

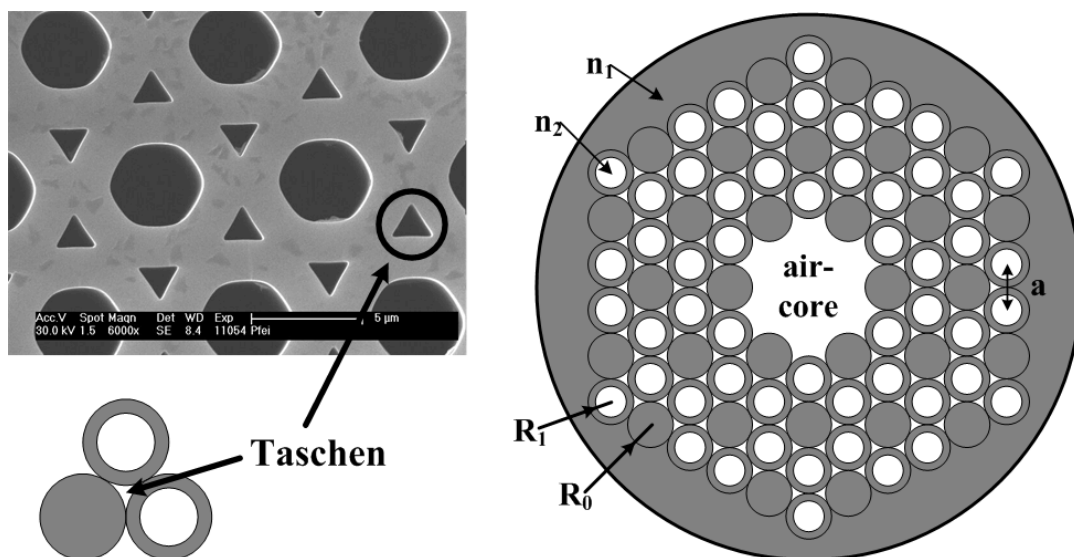


Abb. 5.3: *Links:* Aufnahme eines periodischen Mantels eines gezogenen photonischen Lichtwellenleiters mit einem Elektronenstrahlmikroskop. Der Mantel besteht aus einer dichten Packung aus Glaskapillaren und den daraus resultierenden Taschen. *Rechts:* Schematische Darstellung eines photonischen Luftwellenleiters bestehend aus Glasstäben und Glasrohren, welche ein honigwabenartiges Gitter erzeugen. (REM Bild des Mantels - TU-Ilmenau, Fachgebiet Glas- und Keramiktechnologie um Frau Prof. D. Hülsenberg, hergestellt durch Dipl. Ing. S. Belau).

Der Einfluss der Lufteinschlüsse auf die optischen Eigenschaften wurde durch die Approximation der Taschen mittels Zylinder gezeigt [99, 100]. Die zusätzlichen Zylinder vergrößern die relative Bandlücke von 5,3% auf 6,4% für ein honigwabenartiges Gitter. Ein honigwabenartiges Gitter ermöglicht die Wellenausbreitung in einem Luftdefekt [101, 102].

## 5.1 Kapillarluftwellenleiter

Bei der Berechnung realer photonischer Luftwellenleiter ist die Realisierung der periodischen Mantelstruktur entscheidend. In Abb. 5.4 sind drei verschiedene Möglichkeiten von Basiszellen eines honigwabenartigen Gitters dargestellt. Die Grundzelle (a) beschreibt ein perfektes Gitter ohne den Einfluss der Taschen. Die zweite Variante (b) approximiert die Taschengeometrie mittels zusätzlicher Zwischengitterzylinder [99, 103]. Das reale Design der Taschen ist in Abb. 5.4 (c) dargestellt.

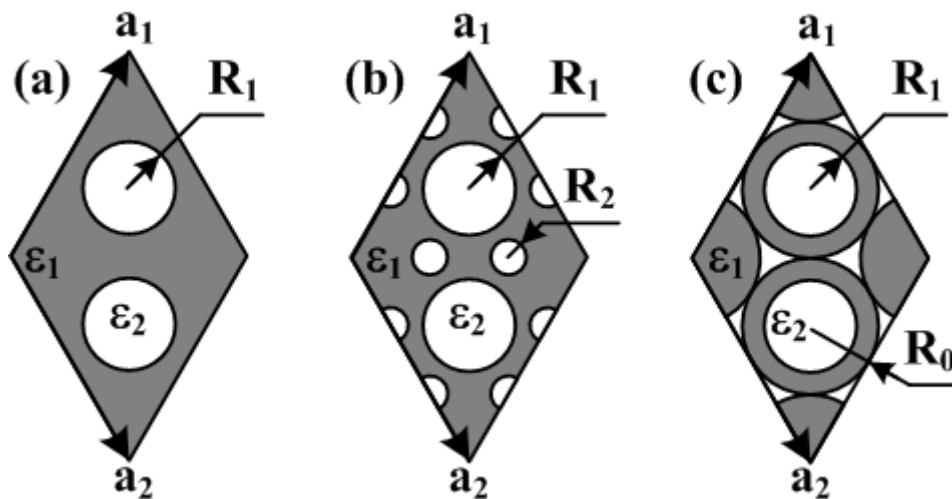


Abb. 5.4: Schematische Darstellung verschiedener Basiszellen eines honigwabenartigen Gitters: (a) Grundzelle, (b) Grundzelle mit Zwischengitter-Defekten und (c) Grundzelle mit Taschen.

Die Berechnung der photonischen Luftwellenleiter basiert auf der in Abschnitt 4.2 vorgestellten ebenen Wellenmethode. Das zu lösende Eigenwertproblem ist

$$\sum_{\mathbf{G}_\gamma} \Theta_{\mathbf{G}_\xi, \mathbf{G}_\gamma} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_\gamma} \\ \mathbf{H}_{2, \mathbf{G}_\gamma} \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{1, \mathbf{G}_\xi} \\ \mathbf{H}_{2, \mathbf{G}_\xi} \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

mit

$$\Theta_{\mathbf{G}_\xi, \mathbf{G}_\gamma} = |\mathbf{k} + \mathbf{G}_\xi| |\mathbf{k} + \mathbf{G}_\gamma| \boldsymbol{\eta}^{-1} (\mathbf{G}_\xi - \mathbf{G}_\gamma) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_\gamma} & -\hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_\gamma} \\ -\hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2, \mathbf{G}_\gamma} & \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_\xi} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1, \mathbf{G}_\gamma} \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

und

$$\eta(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_{\text{Zelle}}} \iint_{\text{Zelle}} \varepsilon(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{A}. \quad (5.3)$$

Dabei ist  $A_{\text{Zelle}} = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$  die Fläche der Basiszelle welche durch die beiden Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  aufgespannt wird. Wie in Abb. 5.4(a) dargestellt, besteht die Basiszelle des honigwabentartigen Gitters aus zwei symmetrisch zum Mittelpunkt verschobenen Zylindern mit dem Radius  $R_1$  und der Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_2$ , umgeben von dem Material mit  $\varepsilon_1$ . Die Fourier-Transformation (siehe Anhang A.1) für die Basiszelle nach Abb. 5.4(a) ergibt sich zu

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} 2f_{R_1} \varepsilon_2 + (1 - 2f_{R_1}) & , \mathbf{G} = \mathbf{0} \\ 2\Psi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) & , \mathbf{G} \neq \mathbf{0} \end{cases}, \quad (5.4)$$

mit

$$f_{R_m} = \frac{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}{\pi R_m^2} = \frac{A_{\text{Cell}}}{A_{R_m}}, \quad m \in [0, 1, 2] \quad (5.5)$$

und

$$\Psi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| R_m)}{|\mathbf{G}| R_m}, \quad (5.6)$$

wobei  $J_1$  die Bessel-Funktion erster Ordnung und  $f_R$  der Füllfaktor in Abhängigkeit des Radius  $R$  ist. Die gerade Kosinusfunktion in Gl. (5.4) verschiebt die Zylinder symmetrisch um den Koordinatenursprung mit dem Translationsvektor  $\mathbf{T}_1 = a(0; 1/2)^T$  in positive und negative  $y$  Richtung.

Eine mögliche Approximation der Taschen durch Zwischengitterzylinder [99, 100], wie in Abb. 5.4(b) dargestellt, ergibt sich aus der Überlagerung der Basiszelle mit 6 zusätzlichen kleineren Zylindern mit dem Radius  $R_2$ . Die Fourier-Transformation  $\eta(\mathbf{G})$  lässt sich in kompakter Form durch

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (2f_{R_1} + 6f_{R_2})\varepsilon_2 + (1 - 2f_{R_1} - 6f_{R_2})\varepsilon_1 & , \mathbf{G} = \mathbf{0} \\ 2\Psi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + \sum_{q=2}^4 2\Psi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_q) & , \mathbf{G} \neq \mathbf{0} \end{cases} \quad (5.7)$$

berechnen. Der erste Term für  $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$  repräsentiert die Grundzelle des honigwabenartigen Gitters wie in Gl. (5.4). Die Zwischengitterzylinder werden durch die Summe dargestellt. Der Translationsvektor  $\mathbf{T}_2 = a(1/2\sqrt{3}; 0)^T$  innerhalb der Kosinusfunktion verschiebt die beiden Zwischengitterzylinder um die x-Achse in der Mitte der Basiszelle.  $\mathbf{T}_3 = a(1/2\sqrt{3}; 1)^T$  bildet die 4 Zylinder, die zwei am Rand der rechten oberen und die zwei am Rand der linken unteren Begrenzung der Basiszelle, ab und  $\mathbf{T}_4 = a(1/2\sqrt{3}; -1)^T$  die vier entgegengesetzten Zylinder. Diese Vereinfachung entsteht durch die Abtastung der Fourier-Transformation im Frequenzraum und der sich daraus ergebenden Periodifizierung im realen Raum.

Die Berechnung der Basiszelle mit Taschen (siehe Abb. 5.4(c)) entsteht initial aus einer leeren Basiszelle, die mit den Zylindern, mit einem Außenradius  $R_0$  und dem Innenradius  $R_1$  überlagert wird.

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (1 - f_{R_0} - 2(f_{R_0} - f_{R_1}))\varepsilon_2 + (f_{R_0} + 2(f_{R_0} - f_{R_1}))\varepsilon_1 & , \mathbf{G} = \mathbf{0} \\ -2\Psi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + 2\Psi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) - \dots & , \mathbf{G} \neq \mathbf{0} \\ -\Psi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_2) & \end{cases} \quad (5.8)$$

Der letzte Term, mit  $\mathbf{T}_5 = a(2\sqrt{3}; 0)^T$ , erzeugt die beiden Zylinder in den Ecken mit  $R_0$ . Das Vorzeichen in Gl. (5.8) wechselt, um der Definition nach Gl. (5.6) zu genügen.

Für die Berechnungen wird der Brechungsindex für Glas von  $n_1 = 1,45$  und Luft von  $n_2 = 1$  verwendet. Der normierte Radius  $R_0/a$  ist 0,5, wobei  $a$  die Gitterkonstante darstellt. Die Gittervektoren werden zu  $\mathbf{a}_1 = a/2(\sqrt{3}; 3)^T$  und  $\mathbf{a}_2 = a/2(\sqrt{3}; 3)^T$  gewählt, um den Kapillardurchmesser identisch der Gitterkonstanten zu halten. Die volle vektorielle Lösung der Gl. (5.1) für das honigwabenartige Gitter mit Taschen ist in Abb. 5.5 *Links* dargestellt. Es zeigt das Dispersionsdiagramm für einen konstanten Wellenvektor senkrecht zur Oberfläche von  $\beta a = 7$  mit  $R_1 = 0,3522a$ . Eine komplette erste Bandlücke existiert zwischen dem 2-ten und 3-ten Band mit den zugehörigen Bandkanten von  $ka = 5,33$  und  $ka = 5,72$ , mit  $k = \omega/c$ . Eine zweite Bandlücke ergibt sich zwischen den Bändern 6 und 7 mit einer Bandmittenfrequenz von  $ka = 6,105$ . Diese beiden Bandlücken liegen für alle in dem Kapitel beschriebenen Kristalle zwischen denselben Bändern. Die Größe und Position der Bandlücken ist abhängig vom normierten Wellenvektor  $\beta a$ .

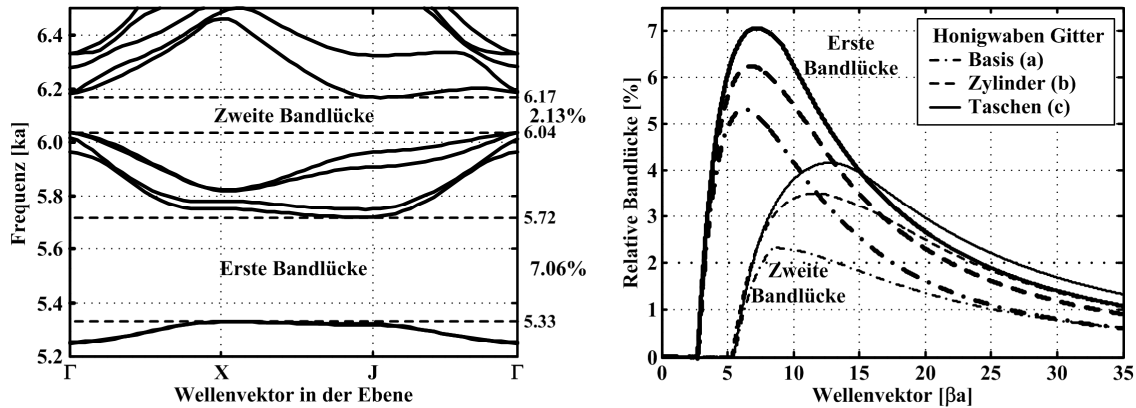


Abb. 5.5: *Links*: Banddiagramm eines honigwabenartigen Gitters mit Taschen (Abb. 5.4 (c)) über die erste Brillouin-Zone, berechnet für einem konstanten Wellenvektor senkrecht zur Oberfläche  $\beta a=7$ . *Rechts*: Relative erste und zweite Bandlücke für die unterschiedlichen Basisgittertypen (Abb. 5.4) als Funktion des Wellenvektors senkrecht zur Oberfläche  $\beta a$ . Für die Berechnungen wurden folgende Parameter verwendet: die Hochsymmetriepunkte mit  $\Gamma=2\pi/3a(0;0)^T$ ,  $X=2\pi/3a(1/\sqrt{3};1)^T$ ,  $J= 2\pi/3a(0;1)^T$  und den Geometrieparameter  $R_0=0,5a$ ,  $R_1=0,3522a$ ,  $R_2=0,083a$ ,  $n_1=1,45$  und  $n_2=1$ .

Für einen Vergleich der unterschiedlichen Gitterstrukturen wird die relative Bandlücke definiert. Diese beschreibt das Verhältnis der absoluten Bandlücke zur Bandmittenfrequenz. Wie in Abb. 5.5 *Links* dargestellt, ergibt sich eine relative Bandlücke von 7,06% für eine absolute Bandlücke von 0,39 mit einer Bandmittenfrequenz von 5,525. Der Verlauf der relativen Bandlücke als Funktion des Wellenvektors  $\beta a$  ist für alle drei Gittertypen in Abb. 5.5 *Rechts* dargestellt. Die erste Bandlücke öffnet sich ab  $\beta a=2,7$  und die zweite bei  $\beta a=5,3$ . Für das Basisgitter (Abb. 5.4(a)) ergibt sich eine maximale relative Bandlücke von 5,33% bei einem Wellenvektor von  $\beta a=6,3$ . Die zusätzlichen Zwischengitterzylinder vergrößern die relative Bandlücke auf 6,3% bei einem Wellenvektor senkrecht zur Oberfläche mit  $\beta a=6,8$ . Diese Resultate stimmen sehr gut mit denen in [99] publizierten überein. Für ein in Abb. 5.3 dargestelltes reales Kristallgitter, welches beim Ziehprozess entsteht, ergibt sich ein relative Bandlücke von 7,07% bei einem Wellenvektor von  $\beta a=7,2$ . Die Bandlücke des honigwabenartigen Gitters mit Taschen verschiebt sich im Vergleich zu dem einfachen Gitter (a) zu höheren Frequenzen wie in Abb. 5.6 *Links* dargestellt. In dem Bereich oberhalb der Lichtlinie  $\beta=k$  ist die Wellenausbreitung in Luft möglich. Die transversalen Moden werden durch den photonischen Kristalleffekt gestoppt, und die Energie breitet sich entlang des Luftdefekts aus.



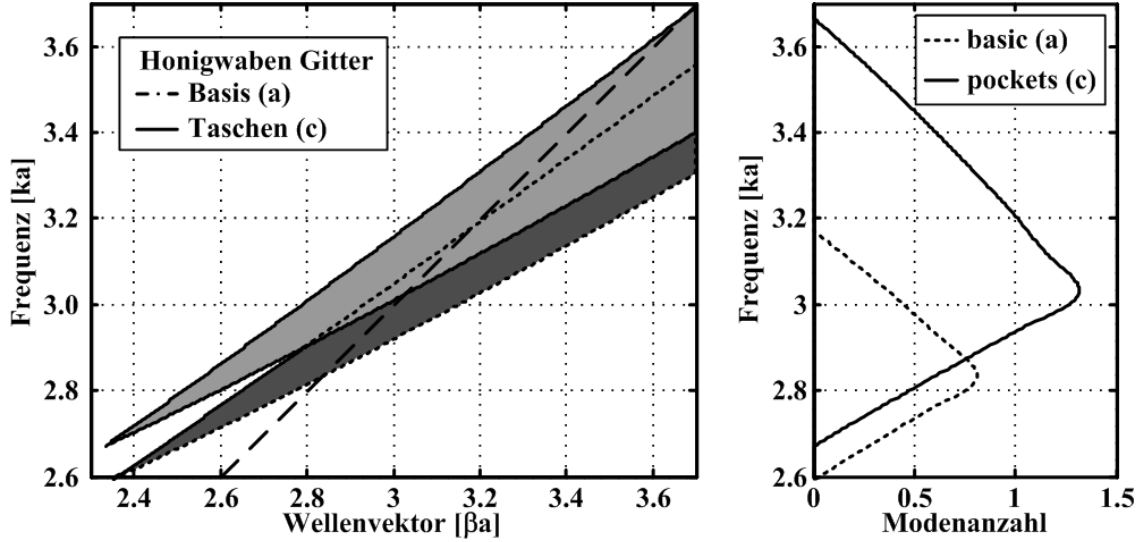


Abb. 5.6: *Links*: Erste Bandlücke eines honigwabenartigen Gitters und Gitters mit Taschen (Abb. 5.4(a) und (c)) mit  $R_0=0,5a$ ,  $R_1=0,47a$ ,  $n_1=1,45$  und  $n_2=1$ . *Rechts*: Approximation der Modenanzahl für eine Defektstruktur, bestehend aus 19 herausgenommenen Kapillaren nach Gl. (5.9).

Mit der Veränderung des Kernradius verändert sich die Anzahl der ausbreitungsfähigen Moden. Für einen zu geringen Kernradius existiert kein ausbreitungsfähiger Mode in der Defektstruktur, und für sehr große Kernradien entstehen höhere zusätzliche Moden. Eine Abschätzung der Modenanzahl  $N_{\text{PBG}}$  in Abhängigkeit des Radius  $R_{\text{Kern}}$  ist gegeben durch [103, 104]

$$r_{\text{Kern}}^2 = \frac{4N_{\text{PBG}}}{(\beta_H^2 - \beta_L^2)} = \frac{4N_{\text{PBG}}}{(k^2 n_2^2 - \beta_L^2)}. \quad (5.9)$$

Dabei sind  $\beta_H$  und  $\beta_L$  die beiden Bandkanten bei einer festen normierten Frequenz  $ka$ . Der effektive Wert für  $\beta_L$  ergibt sich aus dem Minimum des unteren Bandes und der Lichtlinie. Bei  $ka=3$  mit den beiden Bandkanten  $b_H=2,98$  und  $b_L=2,79$  folgt unmittelbar der kleinste mögliche Kernradius von  $R_{\text{Kern}}=1,88a$  bei dem nur eine Mode existiert ( $N_{\text{PBG}}=1$ ). Dies sind ungefähr 14 Kapillaren, die aus dem Bündel herausgenommen werden müssen, um diesem Kernradius zu entsprechen. Für einen symmetrischen und herstellbaren Kern werden bei den weiteren Berechnungen 19 entnommene Kapillaren angenommen. Die exakte Anzahl der Moden und der Modenverlauf werden über Maxwell-Gleichungen Gl. (5.1) berechnet. Die Lösung für eine  $9 \times 9$  große Superzelle mit dem beschriebenen Defekt ist in Abb. 5.7 dargestellt und zeigt in guter Übereinstimmung mit der Approximation die Existenz des fundamentalen Modes.

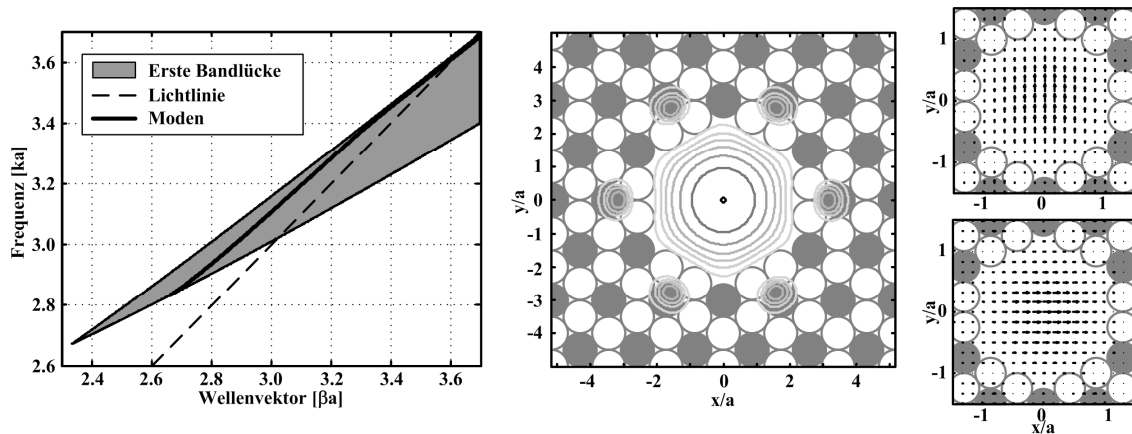


Abb. 5.7: *Links:* Erste Bandlücke (grau) eines perfekten honigwabenartigen Gitters (Abb. 5.4(c)) mit  $R_0=0,5a$ ,  $R_1=0,47a$ ,  $n_1=1,45$  und  $n_2=1$ . Berechnung des realen Modenverlaufes nach Gl. (5.1). Die Berechnungen zeigen die Existenz des doppelt degenerierten fundamentalen Modes als Funktion des Wellenvektors  $\beta a$ . *Mitte:* Intensitätsverteilung des magnetischen doppelt degenerierten Modes als Konturbild mit einer Abstufung der Höhenlinien in -2dB. *Rechts:* Magnetische Polarisation der doppelt degenerierten Moden. Für die Berechnungen wurde eine  $9 \times 9$  große Superzelle mit 19 herausgenommenen Kapillaren als Kern und 2601 ebene Wellen verwendet.

Der fundamentale Mode besteht, wie in der Gruppentheorie beschrieben, aus zwei senkrecht aufeinander stehenden Polarisationszuständen, die theoretisch denselben Modenindex aufweisen [82].

Eine entscheidende Kenngröße photonischer Luftwellenleiter sind die Verluste pro Kilometer. In den letzten Jahren wurden sie verstärkt analysiert und von 13dB/km (2002) [11] auf 1,2dB/km (2005) [13] durch ein optimiertes Design reduziert. Diese liegen derzeit über den in Stufenfasern möglichen Verlusten [105]. Ein Grund dafür sind Abstrahlungsverluste der transversalen Moden aus der periodischen Mantelstruktur. Diese können durch Vergrößerung der Mantelstruktur drastisch (theoretisch gegen Null) reduziert werden [106, 107]. Die entscheidenden Verlustparameter von Luftwellenleitern sind Streuverluste und die Anregung von Oberflächenmoden durch Oberflächenrauigkeiten. Ein Weg, die Oberflächenrauigkeiten zu reduzieren, ist die Optimierung des Herstellungsprozesses. Eine weitere Möglichkeit ist das Design von Luftwellenleitern, bei dem nur der fundamentale Mode innerhalb der Bandlücke existiert. Dies wurde für ein hexagonales Gitter gezeigt [108, 109].

In Abb. 5.8 sind die zwei grundsätzlichen Umsetzungsmöglichkeiten von Kapillarluftwellenleitern gezeigt. Das hexagonale Gitter besteht aus einer dichten Packung aus Glasrohren mit  $n_1=1,45$ , und das honigwabenartige Gitter kombiniert Glasrohre und Glasstäbe.

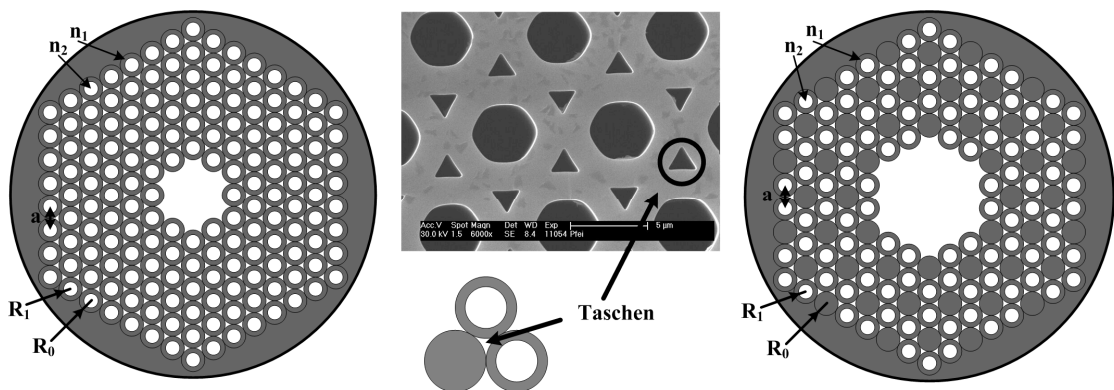


Abb. 5.8: *Links*: Schematische Darstellung eines hexagonalen Luftlichtwellenleiters. *Mitte*: REM eines perfekten realen periodischen Mantels mit Taschen. *Rechts*: Schematische Darstellung eines honigwabenartigen Luftlichtwellenleiters.

Das Einsetzen der Fourier-Transformation des realen photonischen Luftwellenleiters mit Taschen für beide Gittertypen in die Gl. (5.1) ergibt das in Abb. 5.9 dargestellte Modenverhalten innerhalb der photonischen Bandlücke.

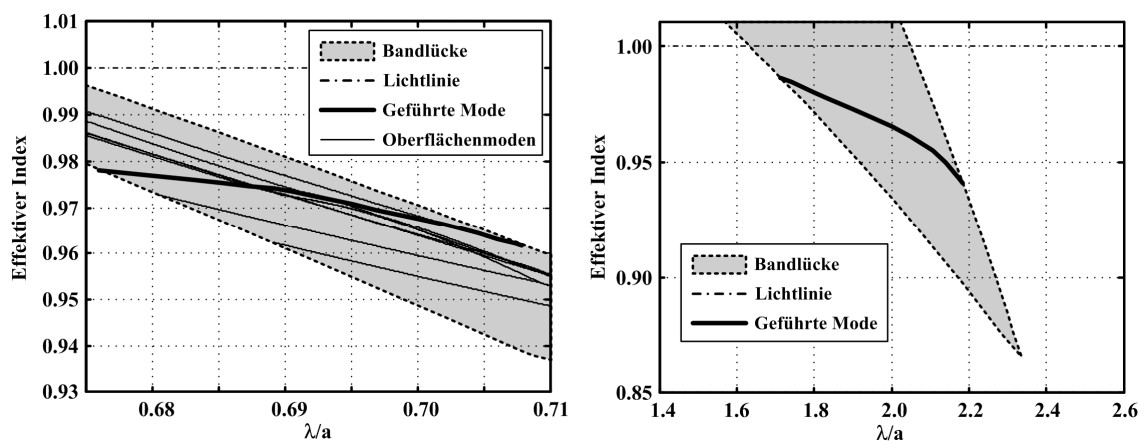


Abb. 5.9: Existierende Moden innerhalb der ersten Bandlücke für *Links*: hexagonales Gitter *Rechts*: honigwabenartiges Gitter.

Im Gegensatz zu dem honigwabenartigen Gitter, wo einzig der fundamentale Mode existiert, ergeben sich bei dem hexagonalen Gitter zusätzliche Oberflächenmoden in der Bandlücke. Diese können durch herstellungsbedingte Fluktuationen leicht angeregt werden und führen zum Energieverlust des fundamentalen Modes.

## 5.2 Kapillarwellenleiter

Reale Kapillarwellenleiter mit Taschen, die auf dem Prinzip der internen Totalreflektion basieren, sind einfacher herzustellen, da der Durchmesser der Glasrohre und Glasstäbe ein Vielfaches der Wellenlänge beträgt. Ein realer hexagonaler Kapillarwellenleiter ist in Abb. 5.10 dargestellt.

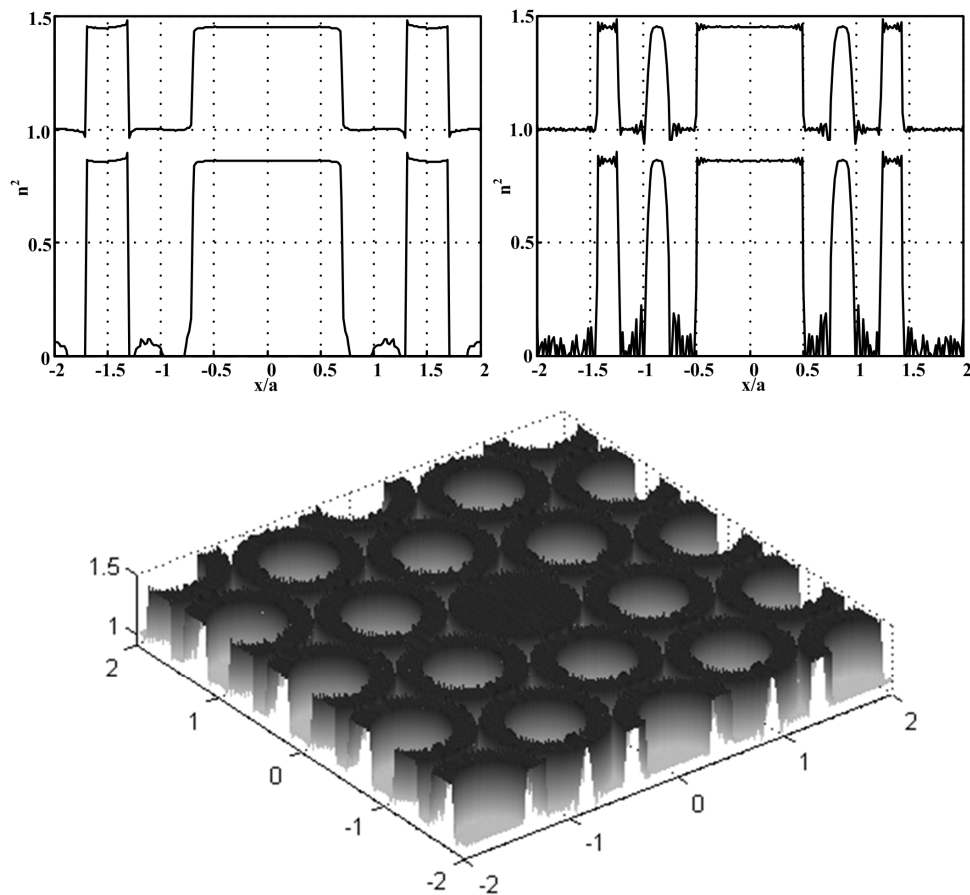


Abb. 5.10: Brechungsindexprofil eines realen hexagonalen photonischen Lichtwellenleiters mit Taschen für  $n_1=1,45$ ,  $n_2=1$ ,  $R=0,3a$  und  $P=300$ .

Die optischen Eigenschaften ergeben sich aus den im Abschnitt 4.3 beschriebenen Gleichungen. Durch Einsetzen des realen Verlaufs des Brechungsindex in die Dispersionsgleichung ergibt sich das in Abb. 5.11 dargestellte Verhalten.

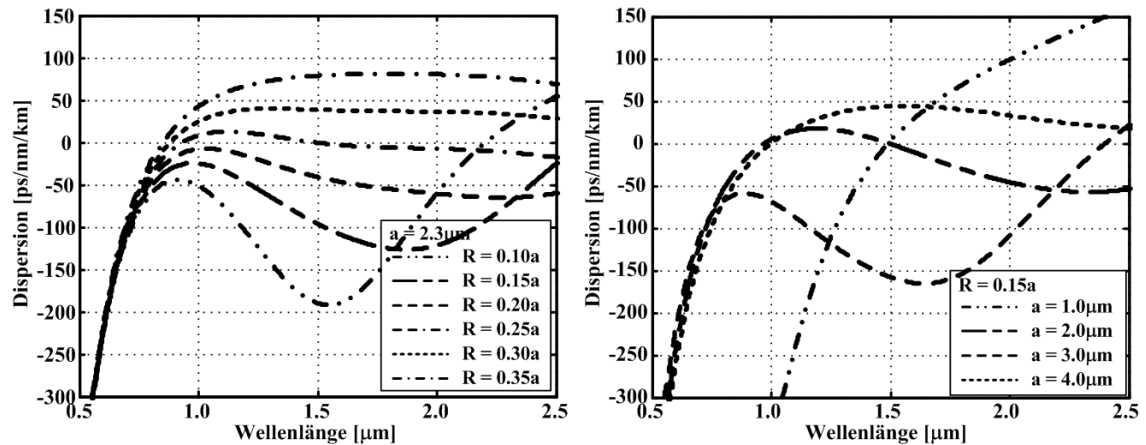


Abb. 5.11: Wellenleiterdispersion plus Materialdispersion des x-polarisierten Mode als Funktion *Links*: des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts*: der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit Taschen für  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Die Gesamtdispersion des realen Kapillarwellenleiters mit einer Gitterkonstanten  $a=2,3 \mu\text{m}$  bei einem normierten Radius von  $R=0,25a$  ist nahezu Null über den gesamten Infrarotbereich von  $1 \mu\text{m}$  bis  $2,5 \mu\text{m}$  und exakt Null bei einer Wellenlänge von  $1,55 \mu\text{m}$ . Die geometrischen Bedingungen, unter der ein realer Kapillarwellenleiter Monomode ist, ist in Abb. 5.12 dargestellt.

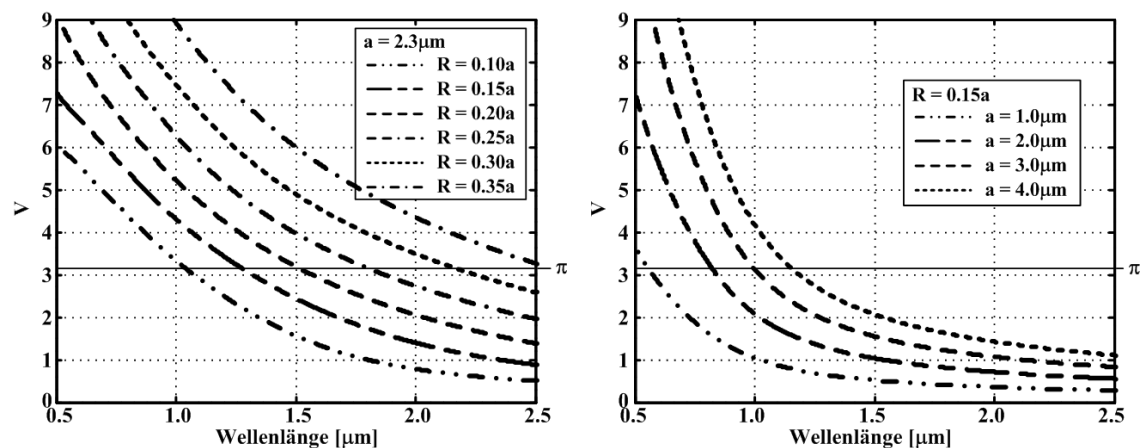


Abb. 5.12: V-Parameter des x-polarisierten Mode als Funktion *Links*: des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts*: der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit Taschen für  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Bei einer Gitterkonstanten von  $a=2,3 \mu\text{m}$  und einem normierten Radius von  $R=0,10a$  ergibt sich eine Lichtwellenleiter mit nur einer ausbreitungsfähigen Mode ab einer Wellenlänge von  $1 \mu\text{m}$ .

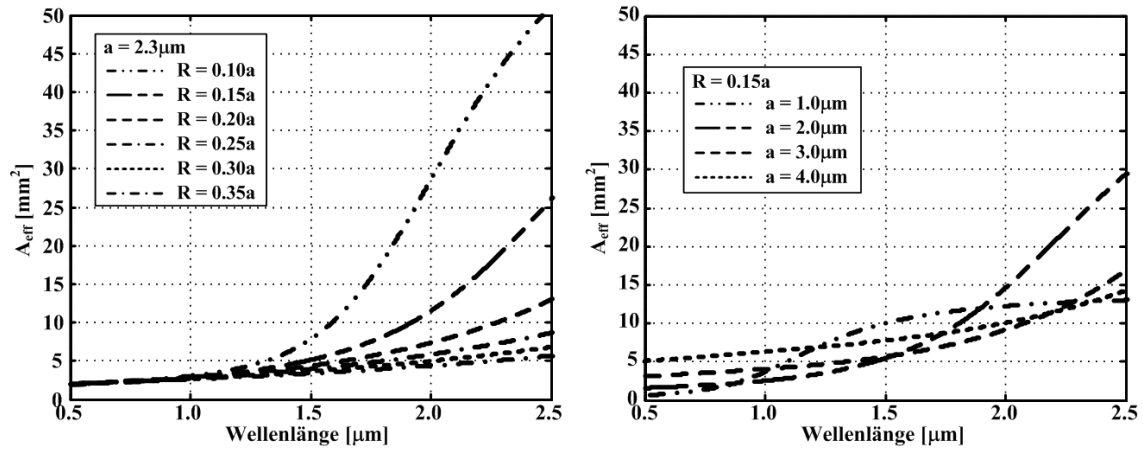


Abb. 5.13: Effektive Fläche des x-polarisierten Mode als Funktion *Links:* des normierten Radius  $R/a$ , *Rechts:* der Gitterkonstanten  $a$  für ein hexagonales Gitter mit Taschen für  $P=512$ ,  $F=8$ ,  $n_1=1,45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_2=1$  (Luft).

Die effektive Fläche ist in Abb. 5.13 dargestellt. Sie ist geringer als bei den herkömmlichen hexagonalen Lichtwellenleitern ohne Taschen (siehe Abb. 4.27). Dies ermöglicht eine höhere Energiedichte bei der Informationsübertragung ohne nichtlineare Effekte.

## 6 Omnidirektionale 2D photonische Kristalle

Die in den vorangegangenen Abschnitten dargestellten photonischen Kristalle, der eindimensionale, zweidimensionale Kristalle und unterschiedliche Lichtwellenleiter besitzen nur Bandlücken für definierte Einstrahlungswinkel. Einzig der eindimensionale omnidirektionale Kristall ermöglicht eine Reflektion der gesamten Energie für jeden Raumwinkel. Eine Möglichkeit, eine komplette Bandlücke über alle Raumwinkel zu erzeugen, sind 3D photonische Kristalle. Diese erlauben eine optimale Lokalisierung der Energie in einer Defektstruktur. Solche Defekte reduzieren Streu- und Abstrahlverluste und führen so zu einer kontrollierten spontanen Emission [110, 111], photonischer Wellenleiter [112] und optischer Resonatoren höchster Güte [113]. Es wurden verschiedenste theoretische Methoden [66, 114, 115] und Herstellungsverfahren für verschiedene Typen von 3D photonischen Kristallen wie Yablonovite, Lincoln Log, Inverse Opals oder Woodpiles [116-120] vorgeschlagen. Das Hauptproblem ist die Herstellung solcher Kristallstrukturen über ein großes Volumen mit einem entsprechenden Brechungsindexkontrast. Ein Ausweg ist die Herstellung von 2½D photonischen Kristallen mit einer quasi 3D Bandlücke.

Eine Möglichkeit sind dünne Membranen aus Silizium umgeben von Luft (Abb. 6.1 *Links*). Diese weisen periodische Lochstrukturen auf und besitzen in der xy-Ebene eine photonische Bandstruktur, und in z-Richtung erfolgt die Lokalisierung des Lichtes über den Brechungsindexkontrast wie in herkömmlichen Stufenfasern. Diese werden für optische Resonatoren [7, 10, 121], in Wellenleitern und Filtern [122] eingesetzt. Ein zweiter Weg ist die Berechnung eines periodischen photonischen Kristalls einer bestimmten Höhe  $h$ , der auf der Ober- und Unterseite mit einer Metallschicht bedeckt ist. Die Metallschicht legt die Grenzbedingungen für die Maxwell-Gleichungen fest [123].

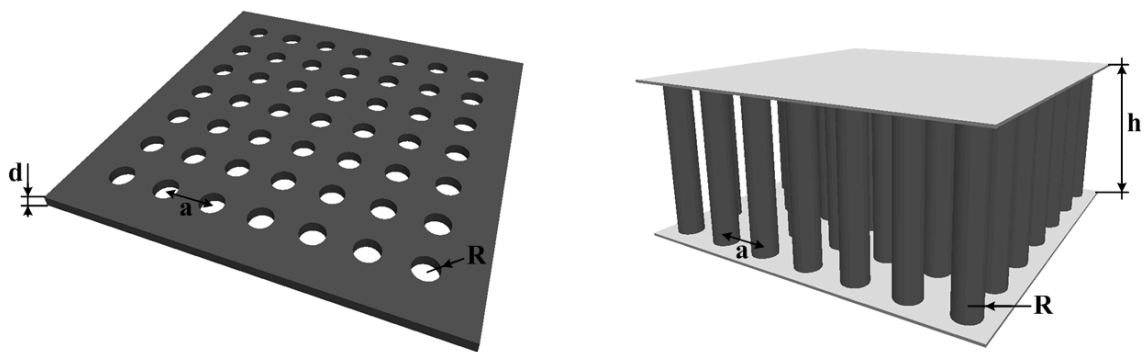


Abb. 6.1: Schematische Darstellung von verschiedenen quasi 3D photonischen Kristallstrukturen. *Links*: photonische Kristall-Membran der Dicke  $d$ . *Rechts*: photonische Kristalle einer bestimmten Höhe  $h$ , die durch eine Metallschicht auf der Ober- und Unterseite begrenzt werden.

Bei der Berechnung photonischer Lichtwellenleiter (siehe Abschnitt 5.1) wurde von einem konstanten Wellenvektor  $k_z$  für alle Frequenzen ausgegangen. Dies beinhaltet auch den Fall für  $\omega=0$ . In der Literatur sind sehr wenige Studien für die Berechnung photonischer Kristalle bekannt, die einen konstanten Einstrahlwinkel  $\theta$  für unterschiedliche Frequenzen annehmen [124, 125]. Zur Illustration des Sachverhaltes ist ein Versuchsaufbau für die Bestimmung der Transmission und Reflektion eines photonischen Kristalls in Abhängigkeit des Einstrahlwinkels  $\theta$  schematisch in Abb. 6.2 dargestellt. Das Bild zeigt einen in z-Richtung invarianten 2D photonischen Kristall, in den eine ebene Welle unter dem Winkel  $\theta$  einfällt. Die ebene Welle breitet sich mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$ , mit einer Komponente in z-Richtung mit  $k_z = k_0 \sin(\theta)$  aus. Die Transmission von elektromagnetischen Wellen wurde für eine hexagonales Gitter bis zu einem Winkel von  $\theta=85^\circ$  mittels der Matrix-Transfer-Methode berechnet [125].

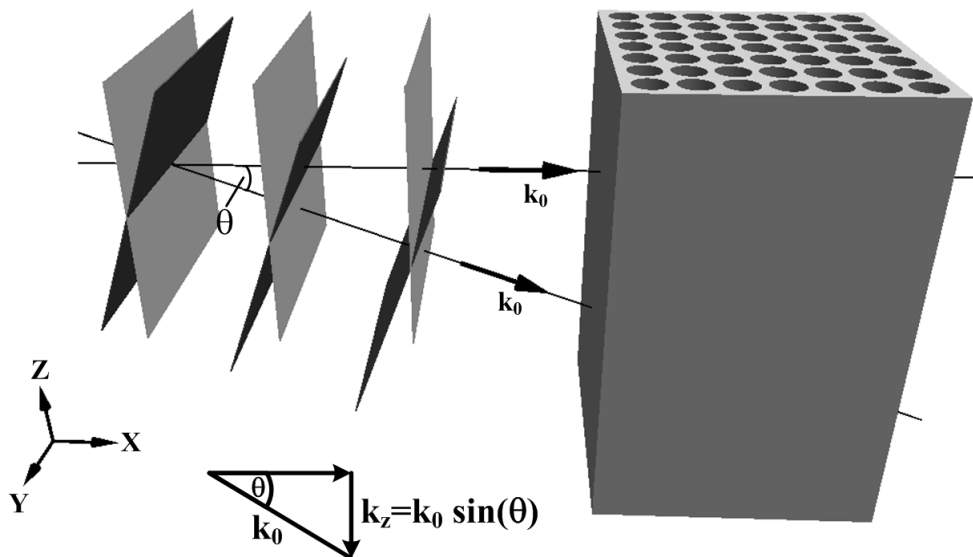


Abb. 6.2: Schematische Darstellung eines Messaufbaus für die Bestimmung der Transmission und der Reflektion in Abhängigkeit des Einstrahlwinkels  $\theta$ . Die Flächen veranschaulichen ebene Wellen mit konstanter Phase, die aus Luft kommend in einen invarianten photonischen Kristall entlang der  $z$ -Achse, mit dem Wellenvektor  $k_z = k_0 \sin(\theta)$ , eingestrahlt werden.

Eine direkte Berechnungsmethode für die Bestimmung der photonischen Bänder für alle Einstrahlwinkel von  $\theta=0^\circ$  bis  $\theta=90^\circ$  wurde durch die ebene Wellenmethode aufgezeigt [124]. Dabei geht der Wellenvektor in  $z$ -Richtung  $k_z$  direkt in die Berechnung ein und verändert sich für alle Frequenzen. Es konnte für das hexagonale Gitter gezeigt werden, dass eine Bandlücke für alle Einstrahlwinkel existiert mit einem Brechungsindex von 3,6 bei einem Radius von  $R=0,455a$ .



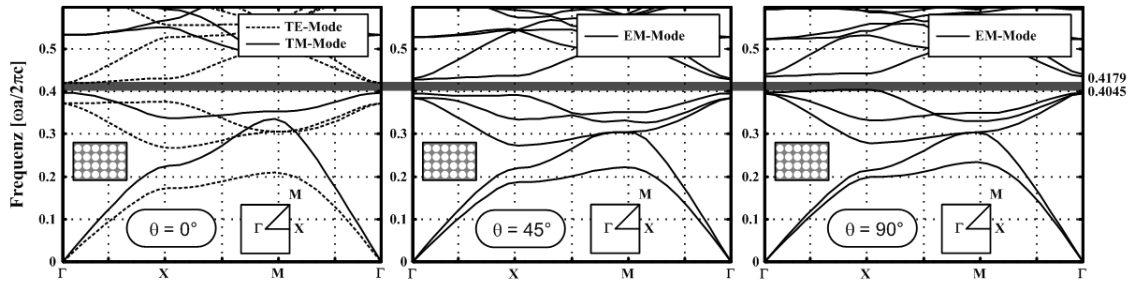


Abb. 6.3: Banddiagramm als Funktion des Einstrahlungswinkels  $\theta$  für ein quadratisches Gitter mit  $n_1=4$ ,  $n_2=1$  und  $R=0,48a$  berechnet nach Gl. (6.2). Die Gittervektoren sind  $\mathbf{a}_1=a(1;0)^T$ ,  $\mathbf{a}_2=a(0;1)^T$  mit den Hochsymmetriepunkten in der ersten Brillouin-Zone mit  $\Gamma=(0;0)^T$ ,  $\mathbf{X}=\pi/a(0;1)^T$  und  $\mathbf{M}=\pi/a(1;1)^T$ . Die Bandlücke ist durch den grauen Bereich gekennzeichnet für *Links*:  $\theta=0^\circ$ , *Mitte*:  $\theta=45^\circ$  und *Rechts*:  $\theta=90^\circ$ .

Die Berechnung der omnidirektionalen 2D photonischen Bandstrukturen basiert auf der ebenen Wellenmethode (siehe Abschnitt 4.2). Der Wellenvektor sei in Abhängigkeit des Einstrahlungswinkels  $\theta$  gegeben mit  $k_z=k_0\sin(\theta)$ . Dabei ist  $k_0=\omega/c$ , mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  und der Lichtgeschwindigkeit  $c$  im Vakuum. Unter der Bedingung eines invarianten, entlang der  $z$ -Achse, zweidimensionalen photonischen Kristalls ergibt sich die Fourier-Transformation der periodischen dielektrischen Funktion  $\varepsilon(\mathbf{r})$  und der Bloch-Wellendarstellung in Abhängigkeit des Winkels  $\theta$  mit der Substitution  $\mathbf{k}+\mathbf{G}=\mathbf{k}_G$  [29, 30, 124, 126] zu

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, z) &= e^{ik_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi} e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_\xi) \cdot \mathbf{r}} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, z) &= e^{ik_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi} e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_\xi) \cdot \mathbf{r}} \\ \varepsilon(\mathbf{r}) &= \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \eta(\mathbf{G}_\xi) e^{j\mathbf{G}_\xi \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\tag{6.1}$$

Das Einsetzen der Gl. (6.1) in die Maxwell-Gleichungen (siehe Anhang A.3), liefert folgendes Eigengleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} \\ \mathbf{T}_{21} & \mathbf{T}_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_\gamma \\ \mathbf{u}_\gamma \end{pmatrix} = \mathbf{k}_0^2 \begin{pmatrix} \mathbf{v}_\xi \\ \mathbf{u}_\xi \end{pmatrix},\tag{6.2}$$

mit

$$\begin{aligned}
T_{11} &= -\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}_{G_\xi} \cdot \mathbf{k}_{G_\gamma}) \\
T_{12} &= -\sin(\theta) \left[ \mathbf{k}_{G_\xi}^x (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q}^y) - \mathbf{k}_{G_\xi}^y (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q}^x) \right] \\
T_{21} &= \sin(\theta) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{k}_{G_\xi}^x \mathbf{k}_{G_\gamma}^y - \mathbf{k}_{G_\xi}^y \mathbf{k}_{G_\gamma}^x) \\
T_{22} &= -\mathbf{k}_{G_\xi}^x (\mathbf{P} \mathbf{Q}^x) - \mathbf{k}_{G_\xi}^y (\mathbf{P} \mathbf{Q}^y)
\end{aligned} \tag{6.3}$$

wobei  $\mathbf{M} = \sin^2(\theta) \mathbf{I} - \boldsymbol{\eta}_{G_{\xi,\gamma}}$ ,  $\mathbf{P} = \sin^2(\theta) \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{I}$ , mit der Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$ ,  $\mathbf{Q}^x = \mathbf{k}_{G_\xi}^x \boldsymbol{\eta}_{G_{\xi,\gamma}}^{-1}$  und  $\mathbf{Q}^y = \mathbf{k}_{G_\xi}^y \boldsymbol{\eta}_{G_{\xi,\gamma}}^{-1}$  entspricht. Gleichung (6.2) beschreibt ein Eigenwertproblem für einen festen Einstrahlwinkel  $\theta$ . Für den Spezialfall der senkrechten Einstrahlung ( $\theta=0^\circ$ ) lässt sich einfach zeigen, dass  $T_{12}$ ,  $T_{21}$  Nullmatrizen werden und Gl. (6.2) in das entkoppelte Eigenwertproblem für TE- und TM-Polarisation (siehe Abb. 6.3, Anhang A.3) zerfällt.

Für alle im Folgenden beschriebenen Berechnungen nach Gl. (6.2) werden 961 ebene Wellen und 32 Wellenvektoren in der ersten Brillouin-Zone verwendet. Dabei ist  $n_2$  der Brechungsindex der Löcher oder der Stäbe umgeben von einem Material  $n_1$  und  $a$  die Gitterkonstante. Das Banddiagramm eines quadratischen Gitters für drei Einstrahlwinkel  $\theta$  ist in Abb. 6.3 dargestellt. Bei einer Welleneinstrahlung in der Ebene ( $\theta=0^\circ$ ) bildet sich eine absolute Bandlücke (TE und TM) aus, welche durch den Hochsymmetriepunkt  $\Gamma$  definiert wird. Mit ansteigenden Einstrahlungswinkeln ( $\theta>0^\circ$ ) verschiebt sich die absolute Bandlücke zu höheren Frequenzen. Der Hochsymmetriepunkt  $X$  wird dominant und gibt die Frequenz der unteren Bandkante an.

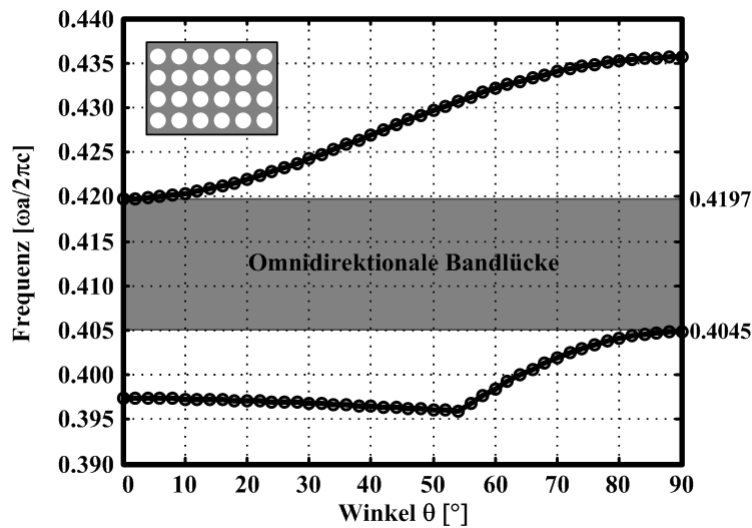


Abb. 6.4: Bandkanten des Bandes 5 und 6 als eine Funktion des Einstrahlungswinkels  $\theta$  für ein quadratisches Gitter (Abb. 6.3) mit der resultierenden omnidirektionale Bandlücke über alle Winkel  $\theta$ .

Das Minimum der unteren Bandkante für das quadratische Gitter liegt bei  $\theta=54^\circ$ . Die Abb. 6.4 zeigt eine komplette omnidirektionale Bandlücke für alle Einstrahlungswinkel von  $0,4045(2\pi c/a)$  bis  $0,4197(2\pi c/a)$ .

Die Abhängigkeit der omnidirektionalen Bandlücke als Funktion des Brechungsindex  $n_2$  ist in Abb. 6.5 *Links* dargestellt. Mit ansteigendem Brechungsindex  $n_1$  verschieben sich die Bandlücken zu niedrigeren Frequenzen, und ab einem Brechungsindex von  $n_1=3.5$  erfolgt eine Überlagerung der beiden Bandlücken für die Grenzbedingungen  $\theta=0^\circ$  und  $\theta=90^\circ$ . Es bildet sich eine omnidirektionale Bandlücke aus. Für einen Vergleich der unterschiedlichen photonischen Kristalltypen wird in Anlehnung an die Lichtwellenleiter eine relative Bandlücke definiert. Sie ergibt sich aus dem Verhältnis von absoluter Bandlücke zu der Bandmittenfrequenz. Die Abhängigkeit der relativen Bandlücke als Funktion des normierten Radius  $R/a$  ist in Abb. 6.5 *Rechts* dargestellt.

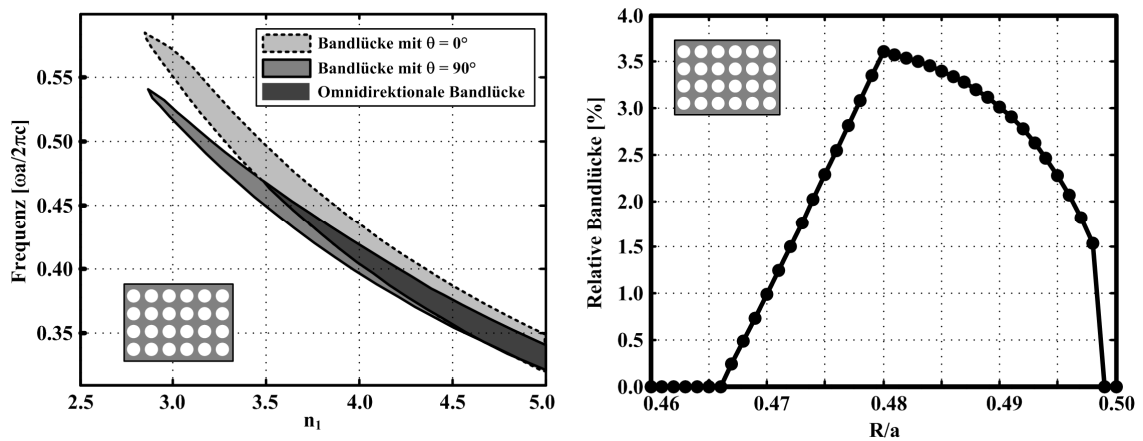


Abb. 6.5: *Links*: Absolute Bandlücke für  $\theta=0^\circ$  und  $\theta=90^\circ$  mit der zugehörigen omnidirektionalen Bandlücke als Funktion des Brechungsindex  $n_1$  für ein quadratisches Gitter mit  $n_2=1$  und  $R=0,48a$ . *Rechts*: Relative omnidirektionale Bandlücke als Funktion des normierten Radius  $R/a$  für ein quadratisches Gitter mit  $n_1=4$  und  $n_2 = 1$ .

Die omnidirektionale Bandlücke ist abhängig von einer Vielzahl von Parametern, wie dem Brechungsindex, dem Einstrahlungswinkel, dem Radius und dem Typ des verwendeten photonischen Kristalls. Bei der Analyse der Bandstrukturen wurde der normierte Radius von 0 bis 0,5 in Schritten von  $\Delta R=0,005$  und der Brechungsindex von 2 bis 4 in  $\Delta n=0,1$  Schritten variiert. Der Bereich der relativen omnidirektionalen Bandlücke für ein quadratisches Gitter ist in Abb. 6.6 in Abhängigkeit des Brechungsindex  $n_2$  und des normierten Radius  $R/a$  dargestellt. Die Graustufen geben die Größe der relativen Bandlücke an. Für das quadratische Gitter ergibt sich eine maximale omnidirektionale Bandlücke von 3,601% für die Bandmittenfrequenz von  $0,412(2\pi c/a)$  bei  $R=0,48a$ ,  $n_1=4$ ,  $n_2=1$ , wie in Abb. 6.4 und Abb. 6.5 gezeigt. Eine Bandlücke existiert für Radien im Bereich von  $R=0,467a$  bis  $R=0,497a$  für einen minimalen Brechungsindex von  $n_1=3,5$  bis zu dem maximal simulierten von  $n_1=4$ .

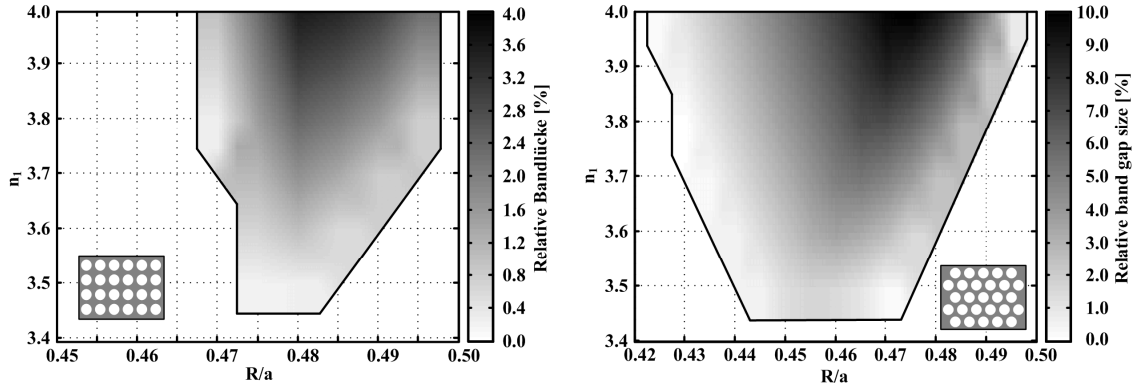


Abb. 6.6: *Links:* Relative omnidirektionale Bandlücke zwischen Band 5 und 6 für ein quadratisches Gitter als Funktion des Brechungsindex  $n_1$  und dem normierten Radius  $R/a$  mit  $n_2=1$ . *Rechts:* Omnidirektionale Bandlücke zwischen Band 3 und 4 eines hexagonalen Gitters als Funktion des Brechungsindex  $n_1$  und dem normierten Radius  $R/a$  mit  $n_2=1$ .

Die Lösung der Eigenwertgleichung Gl. (6.2) für das hexagonale Gitter mit den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1 = a/2(\sqrt{3}; 1)^T$ ,  $\mathbf{a}_2 = a/2(\sqrt{3}; -1)^T$  und den Hochsymmetriepunkten  $\Gamma = (0; 0)^T$ ,  $\mathbf{J} = 4\pi/3a(0; 1)^T$  und  $\mathbf{X} = \pi/\sqrt{3}a(1; \sqrt{3})^T$  führt zu einer relativen omnidirektionalen Bandlücke (siehe Abb. 6.6). Es ist wichtig zu bemerken, dass die Graustufungen sich für die unterschiedlichen Kristallgitter unterscheiden. Die Grauwerte sind auf den maximalen Wert der jeweiligen relativen Bandlücke normiert. Für das hexagonale Gitter ergibt sich eine omnidirektionale Bandlücke im Bereich von  $R=0,43a$  bis  $R=0,49a$  ab einem Brechungsindex des umgebenden Materials von  $n_1=3,45$ . Die maximale relative Bandlücke von 9,591% ergibt sich bei den Geometrieparametern von  $R=0,475a$ ,  $n_1=4$  mit einer Bandmittenfrequenz von  $0,439(2\pi c/a)$  zwischen Band 3 und 4. Diese Resultate stimmen mit denen in [124] gefunden überein.

Das honigwabenartige Gitter besteht aus dielektrischen Stäben umgeben von Luft mit

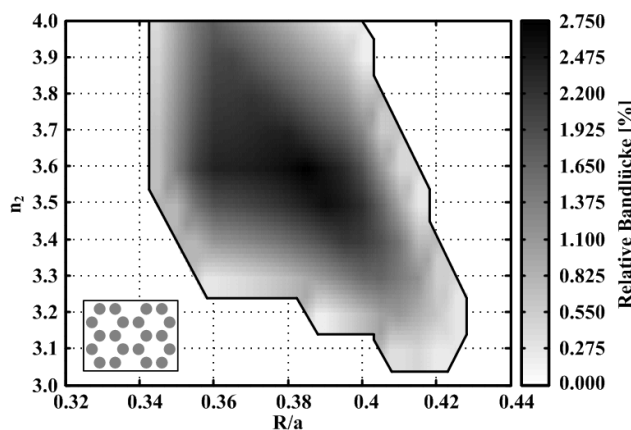


Abb. 6.7: Omnidirektionale Bandlücke eines honigwabenartigen Gitters als Funktion des Brechungsindex  $n_2$  und dem normierten Radius  $R/a$  mit  $n_1=1$ . Die Bandlücke befindet sich zwischen Band 11 und 12.

den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1 = a/2(\sqrt{3}; 3)^T$ ,  $\mathbf{a}_2 = a/2(\sqrt{3}; -3)^T$  und den Punkten der ersten Brillouin-Zone  $\Gamma = (0; 0)^T$ ,  $\mathbf{J} = 2\pi/3a(0; 1)^T$  und  $\mathbf{X} = 2\pi/3a(1/\sqrt{3}; 1)^T$ . Eine omnidirektionale Bandlücke ergibt sich in dem Bereich von  $R=0,345a$  bis  $R=0,425a$ . Der minimale Brechungsindex  $n_2$  für die Ausbildung einer Bandlücke liegt bei 3,1. Die maximale relative Bandlücke von 2,525% ergibt sich bei  $n_1=1$ ,  $n_2=3,6$ ,  $R_1=0,385a$  mit einer Bandmittenfrequenz von  $0,385(2\pi c/a)$  wie in Abb. 6.7

dargestellt. Die omnidirektionale Bandlücke liegt zwischen Band 11 und Band 12.

Ein weiteres photonisches Kristallgitter ist das modifizierte quadratische Gitter, bestehend aus zusätzlichen Zylindern mit einem Radius  $R_2$  in den Ecken der Basiszelle. Dieser Gittertyp ermöglicht eine Vergrößerung der Bandlücke für  $\theta=0^\circ$  im Vergleich zu den normalen quadratischen Gittern [127]. Die relative omnidirektionale Bandlücke als Funktion der beiden normierten Radien  $R_1/a$  und  $R_2/a$  mit einem Brechungsindex  $n_2=4$  (optimaler Wert für das quadratische Gitter, siehe Abb. 6.6) ist in Abb. 6.8 *Links* dargestellt. Eine maximale Bandlücke von 6,5% für  $R_1=0,495a$ ,  $R_2=0,055a$  entsteht zwischen Band 5 und 6 mit einer Bandmittenfrequenz von  $0,465(2\pi c/a)$ . Eine zweite Bandlücke mit dem Maximum von 4% zwischen Band 6 und 7 bildet sich für  $R_1=0,45a$ ,  $R_2=0,21a$  bei einer Bandmittenfrequenz von  $0,533(2\pi c/a)$  aus.

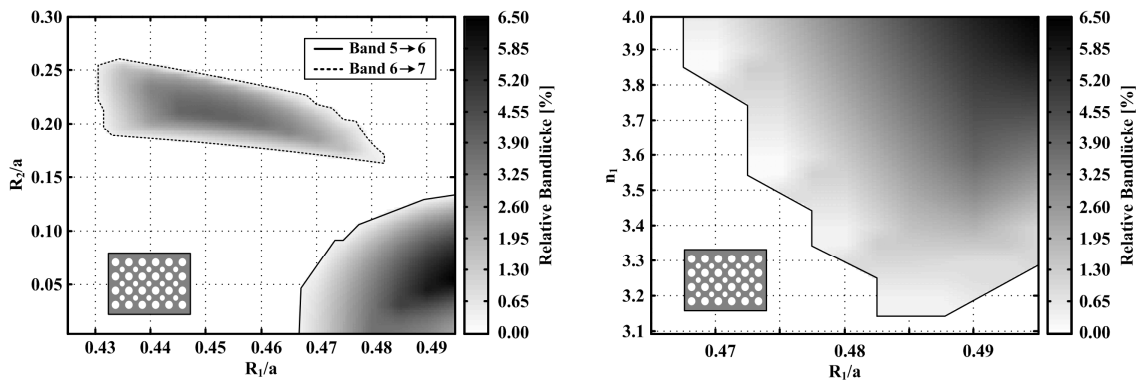


Abb. 6.8: Relative omnidirektionale Bandlücke eines modifizierten quadratischen Gitters mit den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1=a(1;0)^T$ ,  $\mathbf{a}_2=a(0;1)^T$  und den Hochsymmetriepunkten in der ersten Brillouin-Zone mit  $\mathbf{\Gamma}=(0;0)^T$ ,  $\mathbf{X}=\pi/a(0;1)^T$  und  $\mathbf{M}=\pi/a(1;1)^T$ . Relative omnidirektionale Bandlücke *Links*: als Funktion der normierten Radien  $R_1/a$  und  $R_2/a$  mit  $n_1=4$  und  $n_2=1$ . *Rechts*: als Funktion des Brechungsindex  $n_1$  und den normierten Radien  $R_1=0,495a$ ,  $R_2=0,055a$  und  $n_2=1$ .

Die Variation des Brechungsindex  $n_1$  als Funktion des normierten Radius  $R_1/a$  ist in Abb. 6.8 *Rechts* dargestellt. Das modifizierte quadratische Gitter vergrößert im Vergleich zum hexagonalen Gitter die relative Bandlücke von 3% auf 6,5% und reduziert den benötigten Brechungsindex  $n_1$  für eine omnidirektionale Bandlücke von 3,5 auf 3,2.



## 7 Ausblick

Die in dem letzten Abschnitt vorgestellten photonischen Kapillarlichtwellenleiter zweidimensionaler und omnidirektionaler Kristalle ermöglichen ein neuartiges Nahfeld-Tool für zukünftige Nanotechnologien. Die Grundidee des photonischen Nahfeld-Tools beruht auf der bekannten Faseroptik, wie sie aus Waferinspektion und Überwachung von Mikrosystemen bekannt ist. Dabei wird der Ziehling für die Visualisierung des sich unter dem Tool befindlichen Objektes genutzt, wie in Abb. 7.1 dargestellt.

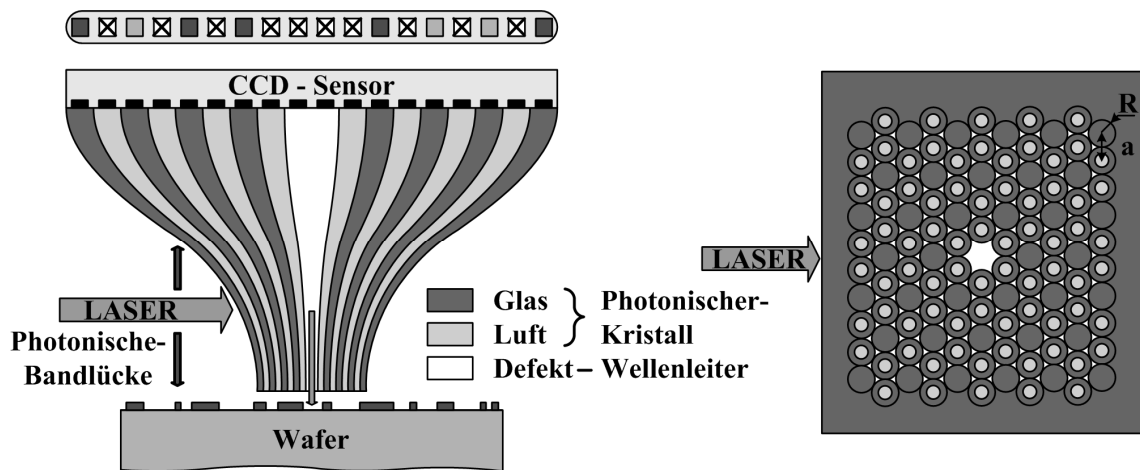


Abb. 7.1: Schematische Darstellung eines photonischen Nanotools zur Visualisierung der Oberfläche unterhalb des Tools mittels Kapillarohtik und Abbildung auf einer CCD bei möglicher gleichzeitiger Modifizierung der Oberfläche durch einen seitlich eingekoppelten Laserstrahl.

Die Erweiterung des Tools ist durch die Geometrie des Ziehlings gegeben. Innerhalb der Verjüngung gibt es Bereiche, in denen für einen bestimmten Frequenzbereich eine Bandlücke entsteht. Ein lateral eingekoppelter Laserstrahl lokalisiert in der Defektstruktur [128] und die Energie wird, wie in einem photonischen Lichtwellenleiter, an die Oberfläche des Wafers geleitet und stellt dort einen Energiestrah zur Oberflächenmodifikation bereit.

Eine reale Umsetzung des Nahfeld-Tools ist nur unter bestimmten Randbedingungen möglich. Eine große Herausforderung ist die Realisierbarkeit mit Glasfasern und dem daraus resultierenden niedrigen Brechungsindexkontrast. Die zweite Schwierigkeit besteht in der Überlagerung einer Bandlücke in der xy-Ebene für die seitliche Lasereinkopplung und einer Bandlücke in der z-Ebene für den Energietransport an die Probenoberfläche im selben Frequenzbereich. Eine mögliche Umsetzung einer solchen photonischen Kristallstruktur ist in Abb. 7.2 dargestellt. Das modifizierte reale honigwabenartige Gitter besteht aus Glaskapillaren mit Taschen bei einem

Brechungsindex  $n_1=1,64$  und Luftlöchern ( $n_2=1$ ) mit den Radien  $R_1=0,5a$ ,  $R_2=0,48a$  und  $R_3=0,241a$ .

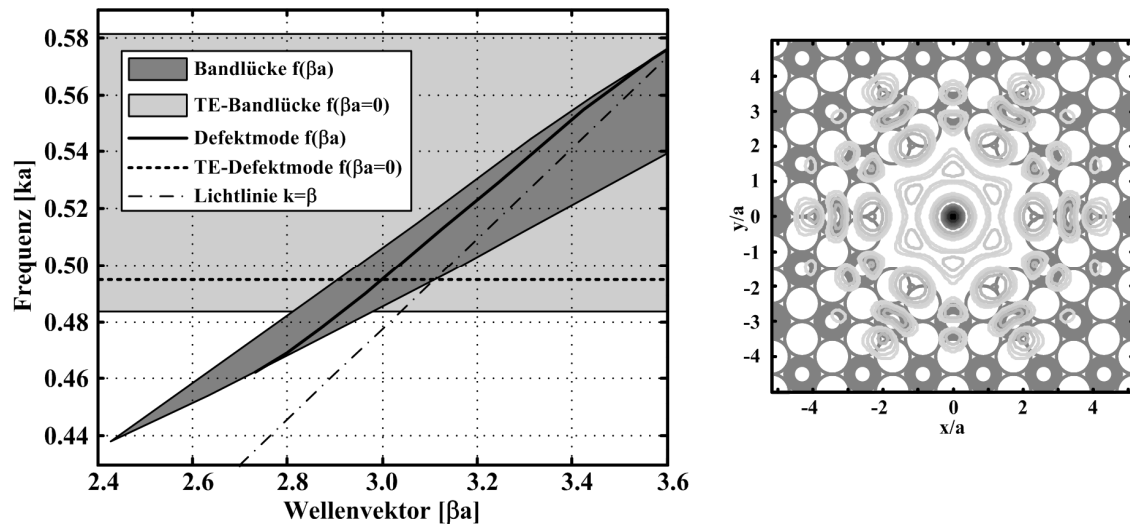


Abb. 7.2: *Links:* Bandstruktur der ersten Bandlücke (dunkelgrau) eines modifizierten honigwabenartigen Gitters mit Taschen als Funktion des Wellenvektors  $\beta a$  und überlagerter TE Bandstruktur (hellgrau) für eine laterale Welleneinstrahlung. Die zugehörigen ausbreitungsfähigen Moden in einer Defektstruktur von 19 entnommenen Kapillaren sind als Funktion von  $\beta a$  und lateraler Einstrahlung dargestellt. Die Strukturparameter mit einem Brechungsindex von  $n_1=1,64$ ,  $n_2=1$ ,  $R_1=0,5$ ,  $R_2=0,48a$ ,  $R_3=0,24a$ . *Rechts:* Feldintensität des elektrischen Feldes als Konturbild in Abstufungen von -1dB bis -5dB und in weiteren -5dB Schritten bis -30dB.

Wie in Abb. 7.2 dargestellt ergibt sich eine TE Bandlücke (hellgrau) in dem Bereich von 0,483 bis 0,581 bei lateraler Einstrahlung und eine überlagerte photonische Bandlücke (dunkelgrau) für einen Wellenvektor  $\beta a$ . Für den Wellenleiter wurden 19 zentrale Kapillaren entfernt, um einen Luftwellenleiter zu erzeugen. Es entstehen der fundamentale Monomode bei der Wellenausbreitung in z-Richtung und ein TE-Mode für die Lokalisierung in der Defektstruktur bei seitlicher Einstrahlung. Eine zweite mögliche Variante ist die Umsetzung durch omnidirektionale Kristallstrukturen.

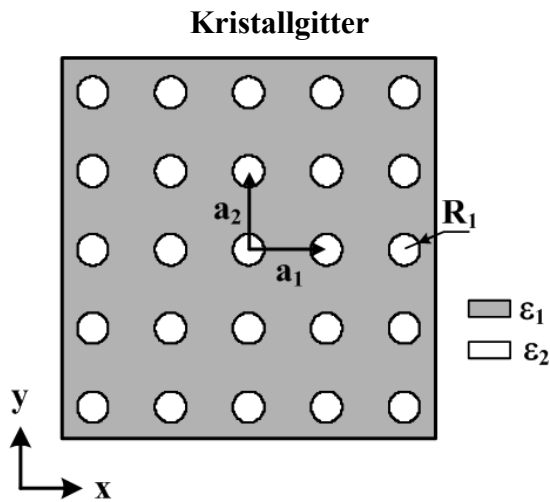
Dieses Tool ermöglicht neue Anwendungsfelder für eine schnelle Visualisierung und Modifikation der Oberfläche.



# A Anhang

## A.1 Kristallgittertypen

### Quadratisches Gitter



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

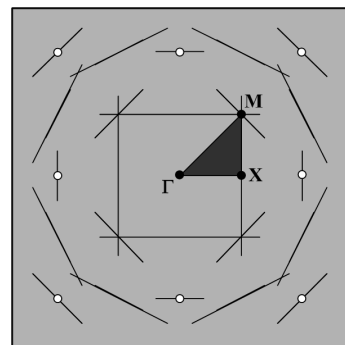
### Symmetrie-Punkte

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone

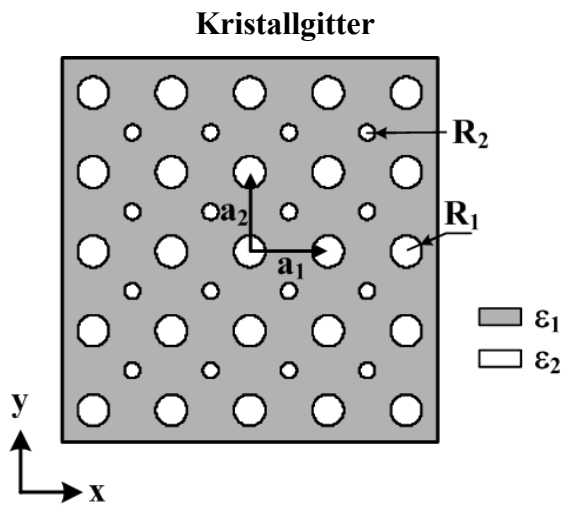


### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} f_{\mathbf{R}_1} \epsilon_2 + (1 - f_{\mathbf{R}_1}) \epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \Xi_{\mathbf{G}, \mathbf{R}_1} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{\mathbf{R}_1} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi \mathbf{R}_1^2},$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, \mathbf{R}_1} = 2f_{\mathbf{R}_1} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| \mathbf{R}_1)}{|\mathbf{G}| \mathbf{R}_1}$$

## Modifiziertes quadratisches Gitter



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

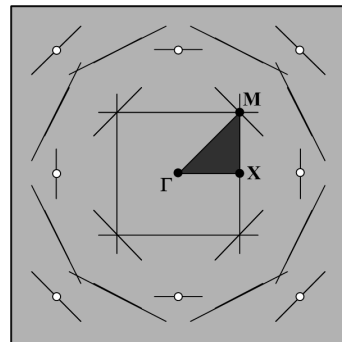
### Symmetrie-Punkte

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



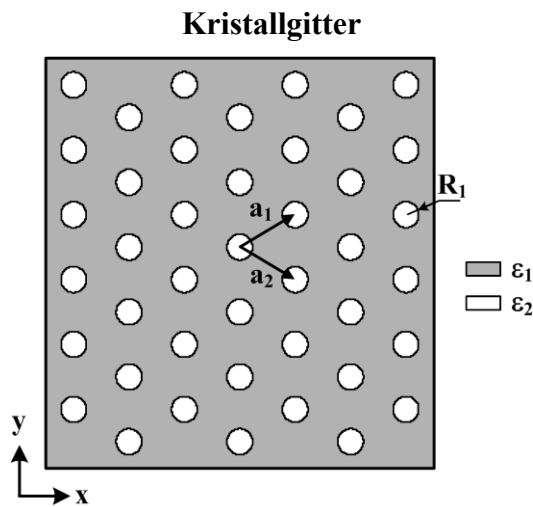
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (f_{R_1} + f_{R_2})\epsilon_2 + (1 - f_{R_1} - f_{R_2})\epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \Xi_{\mathbf{G}, R_1} + \Xi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m}, \quad m = [1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Hexagonales Gitter



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

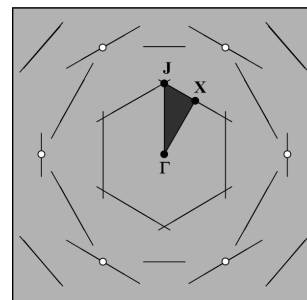
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{4\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone

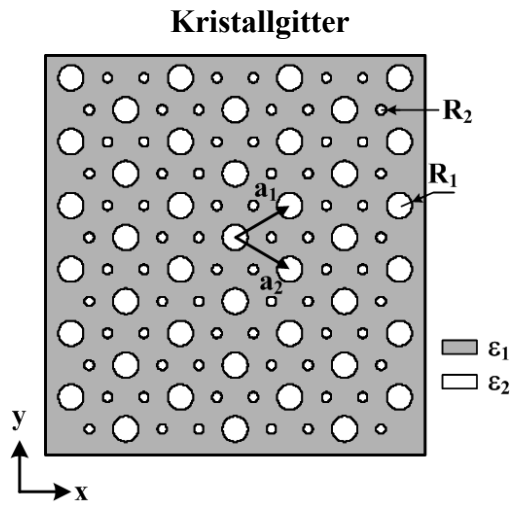


### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} f_{R_1} \epsilon_2 + (1 - f_{R_1}) \epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \Xi_{\mathbf{G}, R_1} & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_1} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_1^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_1} = 2f_{R_1} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| R_1)}{|\mathbf{G}| R_1}$$

## Hexagonales Gitter mit Zylindern



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

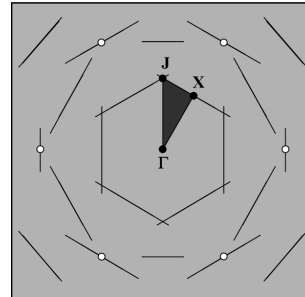
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{4\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



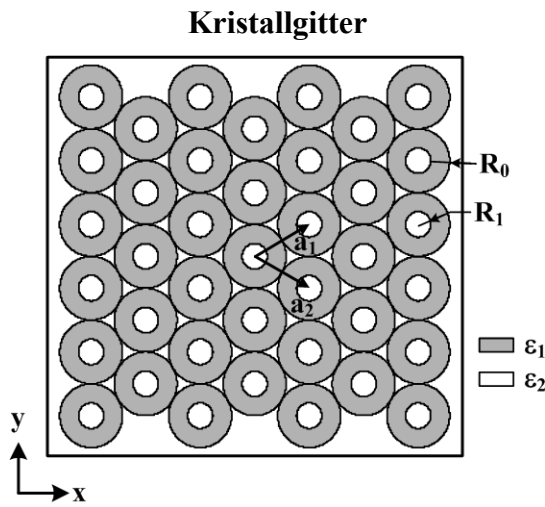
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (f_{R_1} + f_{R_2})\epsilon_2 + (1 - f_{R_1} - f_{R_2})\epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \Xi_{\mathbf{G}, R_1} + \Xi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m}, \quad m = [1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Hexagonales Gitter mit Taschen



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

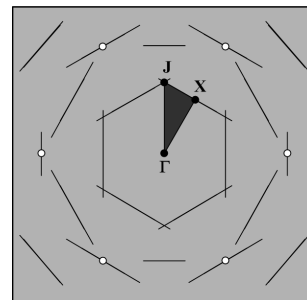
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{4\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



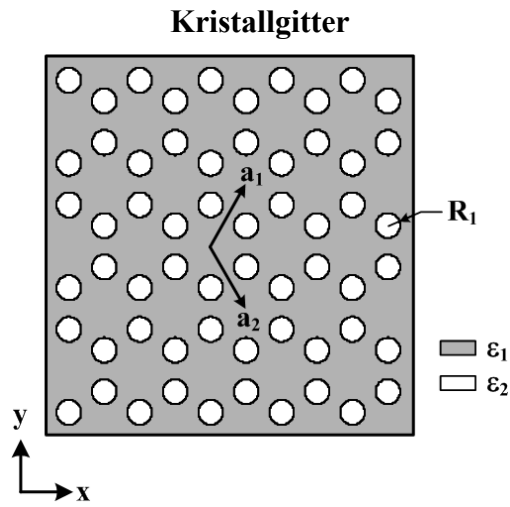
### Fourier-Transformation von $\varepsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (1 - (f_{\mathbf{R}_0} - f_{\mathbf{R}_1}))\varepsilon_2 + (f_{\mathbf{R}_0} - f_{\mathbf{R}_1})\varepsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ \Xi_{\mathbf{G}, \mathbf{R}_0} - \Xi_{\mathbf{G}, \mathbf{R}_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{\mathbf{R}_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, \mathbf{R}_m} = 2f_{\mathbf{R}_m} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m}, \quad m = [0, 1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Honigwabenartiges Gitter



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

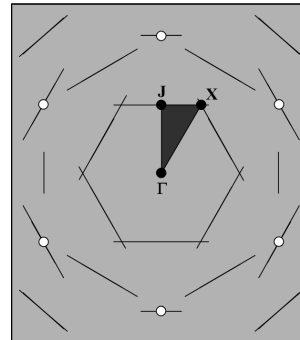
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



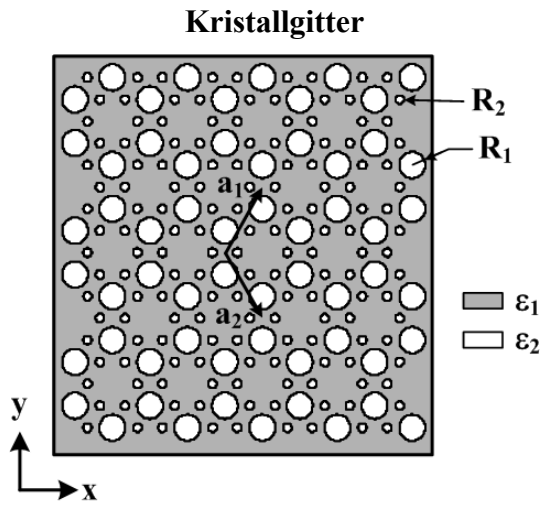
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} 2f_{R_1} \epsilon_2 + (1 - 2f_{R_1}) \epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2\Xi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_1} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_1^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_1} = 2f_{R_1} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_1)}{|\mathbf{G}|R_1}$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Honigwabenartiges Gitter mit Zylindern



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

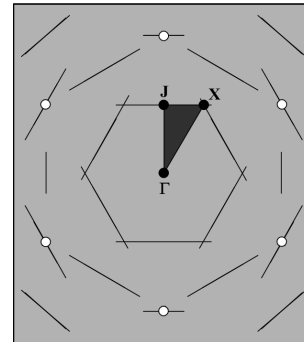
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



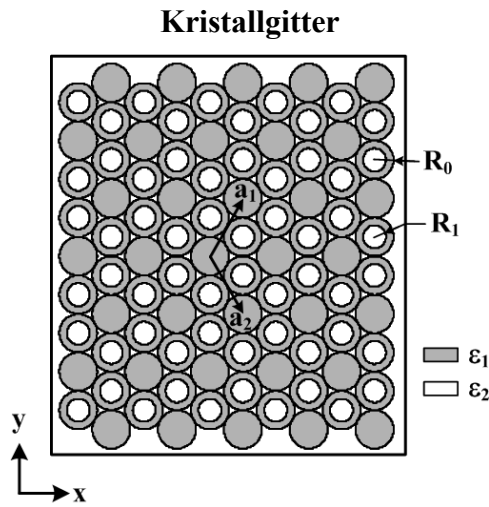
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (2f_{R_1} + 6f_{R_2})\epsilon_2 + (1 - 2f_{R_1} - 6f_{R_2})\epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2\Xi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + \sum_{q=2}^4 2\Xi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_q) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m} \quad , m = [1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_3 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_4 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

## Honigwabenartiges Gitter mit Taschen



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

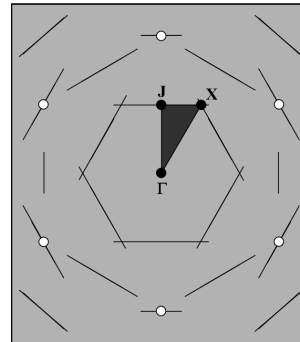
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

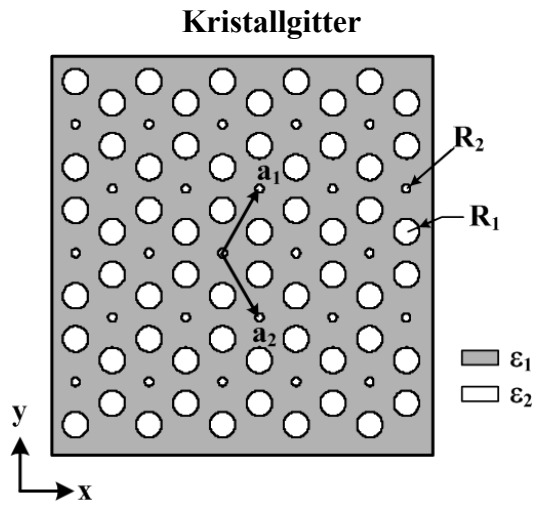
$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} \left( (1 - f_{R_0} - 2(f_{R_0} - f_{R_1})) \right) \epsilon_2 + \left( f_{R_0} + 2(f_{R_0} - f_{R_1}) \right) \epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ -2\Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + 2\Xi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) - \dots & \text{mit } f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2} \\ -\Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_2) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| R_m)}{|\mathbf{G}| R_m}, \quad m = [0, 1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$



## Modifiziertes honigwabenartiges Gitter



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

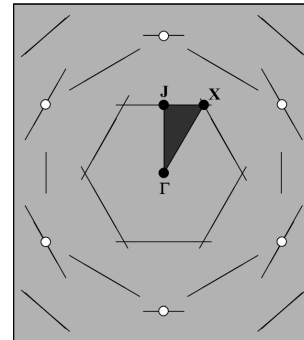
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



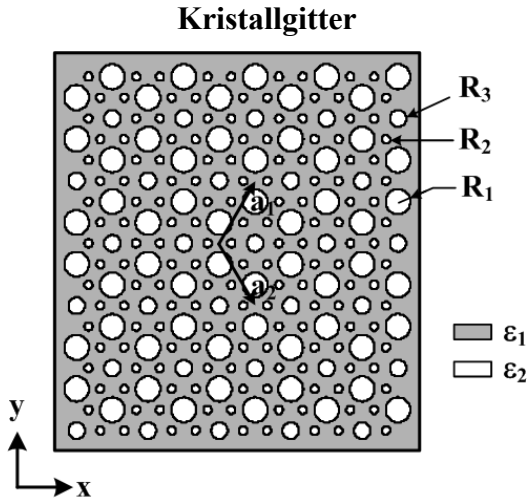
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (f_{R_1} + f_{R_2})\epsilon_2 + (1 - f_{R_1} - f_{R_2})\epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2\Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + \Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_2) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m}, \quad m = [1, 2]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

## Modifiziertes honigwabentartiges Gitter mit Zylindern



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

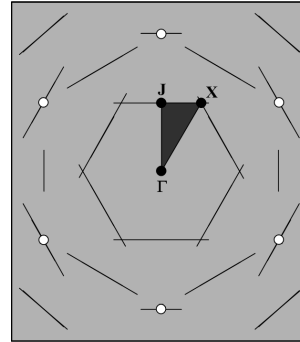
### Symmetrie-Punkte

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



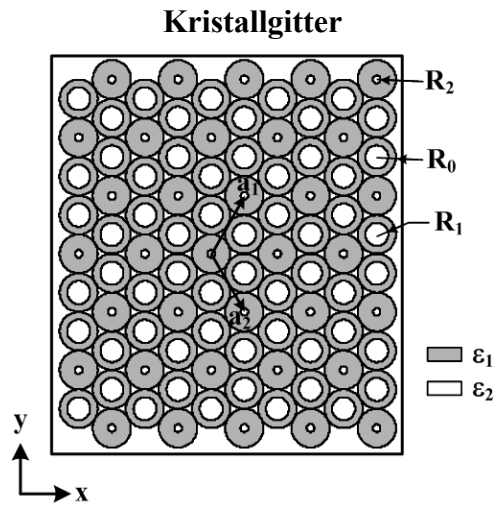
### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} (2f_{R_1} + 6f_{R_2})\epsilon_2 + (1 - 2f_{R_1} - 6f_{R_2})\epsilon_1 & , \mathbf{G} = 0 \\ 2\Xi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + \sum_{q=2}^4 2\Xi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_q) + \dots & \text{mit } f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2} \\ + \Xi_{\mathbf{G}, R_3} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_5) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases}$$

$$\Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}|R_m)}{|\mathbf{G}|R_m}, \quad m = [1, 2, 3]$$

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_3 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_4 = \frac{a}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_5 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

## Modifiziertes honigwabenartiges Gitter mit Taschen



### Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \end{pmatrix}$$

### Reziproke Gittervektoren

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

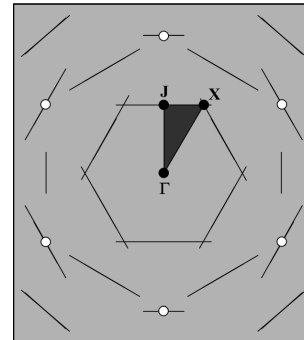
### Symmetrie-Punkte

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

### Brillouin-Zone



### Fourier-Transformation von $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\eta(\mathbf{G}) = \begin{cases} \left(1 - (f_{R_0} - f_{R_2}) - 2(f_{R_0} - f_{R_1})\right)\epsilon_2 + \left((f_{R_0} - f_{R_2}) + 2(f_{R_0} - f_{R_1})\right)\epsilon_1, & \mathbf{G} = 0 \\ -2\Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) + 2\Xi_{\mathbf{G}, R_1} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_1) - \dots \\ -\Xi_{\mathbf{G}, R_0} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_2) + \Xi_{\mathbf{G}, R_2} \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}_2) & , \mathbf{G} \neq 0 \end{cases}$$

$$f_{R_m} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\pi R_m^2}, \quad \Xi_{\mathbf{G}, R_m} = 2f_{R_m} (\epsilon_2 - \epsilon_1) \frac{J_1(|\mathbf{G}| R_m)}{|\mathbf{G}| R_m}, \quad m = [0, 1, 2]$$

mit

$$\mathbf{T}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

## A.2 Ebene Wellenmethode

Die makroskopischen Maxwell-Gleichungen für ein verlust- und quellenfreies periodisches Medium mit einer relativen Permeabilität  $\mu_r=1$  im Frequenzraum lauten

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= j\omega \varepsilon_0 \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) & \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= -j\omega \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) & \nabla \cdot \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= 0\end{aligned}\tag{A.1}$$

Das elektrische Feld  $\mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{E}$ , das magnetische Feld  $\mathbf{H}(\mathbf{r})=\mathbf{H}$  und die Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon(\mathbf{r})=\varepsilon$  sind abhängig vom Ort. Die Division von  $\varepsilon$  und Rotationsbildung liefern

$$\begin{aligned}\nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= j\omega \varepsilon_0 \nabla \times \mathbf{E} \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -j\omega \mu_0 \nabla \times \mathbf{H}\end{aligned}\tag{A.2}$$

Das Einsetzen der Rotation aus Gl. (A.1) führt zu den entkoppelten Gleichungen für das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  und das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$  im Vakuum.

$$\begin{aligned}\nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H} \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon \mathbf{E}\end{aligned}\tag{A.3}$$

Mit der Fourier-Transformation und dem Bloch-Theorem folgt für das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  und das periodische Kristallgitter  $\varepsilon$  [29, 30]

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\xi}) \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} = \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \\ \varepsilon &= \sum_{\varsigma=-\infty}^{\infty} \eta(\mathbf{G}_{\varsigma}) e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\tag{A.4}$$

Nach dem Einsetzen der Gl. (A.4) in Gl. (A.3) folgt

$$\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} = \nabla \times \left[ \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \left( \nabla \times \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \right) \right]. \quad (\text{A.5})$$

$H_{\mathbf{G}_{\xi}}$  ist unabhängig vom Ort. Die Rotation wird in die Summe gezogen und unter Nutzung der Gl. (A.97) mit  $\nabla \times (\mathbf{u}\mathbf{A}) = -\mathbf{A} \times \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla \times \mathbf{A}$  und der Ableitung  $\nabla e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = j\mathbf{k} e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} &= \nabla \times \left[ \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \nabla \times (\hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}}) \right] \\ &= -\nabla \times \left[ \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \times \nabla e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \right] \\ &= -\nabla \times \left[ \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Der zweite Summand  $\mathbf{u} \nabla \times \mathbf{A}$  ist nicht vom Ort abhängig und wird zu Null. Auflösen der Substitution  $\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} = \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi}$  und das Zusammenfassen der Terme liefert

$$\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} = -\nabla \times \left[ \sum_{\varsigma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} H_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v, \mathbf{G}_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma}) \cdot \mathbf{r}} \right]. \quad (\text{A.7})$$

Die Substitution  $\mathbf{G}_{\gamma} = \mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma}$  entspricht einer Faltung der Funktionen. Beide Reihen sind unendlich und mit demselben Wertevorrat, somit geht der Summationsindex in  $\gamma - \xi \Rightarrow \gamma$  über, mit  $\eta_{(\mathbf{G}_{\gamma} - \mathbf{G}_{\xi})} = \eta_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}}$  folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v,G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} &= -\nabla \times \left[ \sum_{\gamma \neq \xi} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{(G_{\gamma}-G_{\xi})}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} e^{j(\mathbf{k}+G_{\gamma}) \cdot \mathbf{r}} \right] \\
&= -\nabla \times \left[ \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}} \right] \\
&= -\sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \nabla \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}} \\
&= \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times \nabla \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Das Vorzeichen ändert sich durch das Tauschen der Rotationsterme und nochmaliges Anwenden von Gl. (A.97) liefert

$$\begin{aligned}
\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v,G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} &= \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \nabla e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}} \\
&= \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}} . \\
&= \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} \times \mathbf{k}_{G_{\gamma}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

mit

$$(\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}}) \times \mathbf{k}_{G_{\gamma}} = \left[ (\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}}) \cdot (\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\gamma}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\gamma}} \tag{A.10}$$

folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v,G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} &= \dots \\
&= \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} H_{v,G_{\xi}} \left[ (\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}}) \cdot (\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\gamma}}) \right] \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\gamma}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \cdot \mathbf{r}} .
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Tauschen der Summationssymbole und die Division durch  $\hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{G_{\xi}} \cdot \mathbf{r}}$  ergibt

$$\sum_{\xi} \sum_{\gamma} \sum_{v=1}^2 \eta_{G_{\gamma,\xi}}^{-1} \left[ (\mathbf{k}_{G_{\gamma}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\gamma}}) \cdot (\mathbf{k}_{G_{\xi}} \times \hat{\mathbf{e}}_{v,G_{\xi}}) \right] H_{v,G_{\gamma}} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\xi} \sum_{v=1}^2 H_{v,G_{\xi}} . \tag{A.12}$$

Das Umformen der Gleichung resultiert in [66]

$$\sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}^{-1} \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\gamma} \right| \left| \mathbf{k} + \mathbf{G}_{\xi} \right| \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_{\gamma}} & -\hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_{\gamma}} \\ -\hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{2,\mathbf{G}_{\gamma}} & \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_{\xi}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{1,\mathbf{G}_{\gamma}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{1,\mathbf{G}_{\gamma}} \\ H_{2,\mathbf{G}_{\gamma}} \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{bmatrix} H_{1,\mathbf{G}_{\xi}} \\ H_{2,\mathbf{G}_{\xi}} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

Dies stellt die allgemeine Lösung im 3D Raum für die ebene Wellenmethode dar.

### A.3 Omnidirektionale 2D Kristalle

Für die Herleitung wird das Gauß'sche-Einheiten-System (CGS) verwendet [129]. Ausgangspunkt der Überlegungen sind die Maxwell-Gleichungen für das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  und das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  im Fourier-Raum für eine periodische, verlustfreie und dielektrische Struktur  $\varepsilon(\mathbf{r})$ . Das Feldgebiet möge Quellenfreiheit aufweisen.

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= -jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= jk_0 \mathbf{H} & \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Die Rotation auf die Maxwell-Gleichungen angewandt liefert

$$\begin{aligned} \nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= -jk_0 \nabla \times \mathbf{E} = k_0^2 \mathbf{H} \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= jk_0 \nabla \times \mathbf{H} = k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Die Gl. (A.14) können in kartesische Koordinaten nach Gl. (A.95) überführt werden.

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) &= -jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_x & \left( \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) &= jk_0 H_x \\ \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) &= -jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y & \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) &= jk_0 H_y \\ \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) &= -jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_z & \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) &= jk_0 H_z \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Die Rotationen der Maxwell-Gleichungen Gl. (A.15) werden in die einzelnen Feldkomponenten entlang der Achsen aufgespaltert. Für die elektrische Feldkomponente  $E_y$  ergibt sich

$$\begin{aligned} \nabla \times \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right] &= k_0^2 \mathbf{H} \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right]_{e_z} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right]_{e_y} &= k_0^2 H_x \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \right] &= k_0^2 H_x \end{aligned} \quad (A.17)$$

Durch die Substitution nach Gl. (A.16), mit  $\left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) = -jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y$ , folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] + jk_0 \frac{\partial E_y}{\partial z} &= k_0^2 H_x \\ \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] - jk_0 H_x \end{aligned} \quad (A.18)$$

Die Feldkomponente  $E_x$  ergibt sich analog zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right]_{e_x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla \times \mathbf{H}) \right]_{e_z} &= k_0^2 H_y \\ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] &= k_0^2 H_x \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} &= -\frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] + jk_0 H_y \end{aligned} \quad (A.19)$$



Die magnetischen Feldkomponenten werden aus der zweiten Gl. (A.15) gewonnen. Mittels Auflösen der Rotation und Einsetzen der Feldkomponente (Gl. (A.16)) folgt für  $H_y$

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} \\
 \frac{\partial}{\partial y} (\nabla \times \mathbf{E})_{e_z} - \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \times \mathbf{E})_{e_y} &= k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) E_x \\
 \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) &= k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) E_x \\
 \frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) + jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_x
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

und  $H_x$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \times \mathbf{E})_{e_x} - \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \times \mathbf{E})_{e_z} &= k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y \\
 \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) &= k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y \\
 \frac{\partial H_x}{\partial z} = \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) - jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

Die Feldkomponenten in kompakter Form lauten

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_x}{\partial z} &= -\frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] + jk_0 H_y \\
 \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right] - jk_0 H_x \\
 \frac{\partial H_x}{\partial z} &= \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right] - jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y \\
 \frac{\partial H_y}{\partial z} &= \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right] + jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_x
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

Unter der Annahme, dass eine ebene Welle aus Luft, unter einem Winkel  $\theta$ , auf einen Kristall trifft, folgt der resultierende Wellenvektor  $k_z = k_0 \sin(\theta)$ . Mit Hilfe des Bloch-Theorems, dem Ansatz harmonischer Schwingungen und der Fourier-Transformation der periodische dielektrischen Funktion  $\varepsilon(\mathbf{r})$  folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, z) &= e^{jk_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\xi})\cdot\mathbf{r}} = e^{jk_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, z) &= e^{jk_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\xi})\cdot\mathbf{r}} = e^{jk_0 \sin(\theta)z} \sum_{\xi} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} . \\ \varepsilon(\mathbf{r}) &= \sum_{\varsigma=-\infty}^{\infty} \eta(\mathbf{G}_{\varsigma}) e^{j\mathbf{G}_{\varsigma}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Das Einsetzen von  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, z)$  und  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, z)$  aus Gl. (A.23) in Gl. (A.22) für die x Komponente des elektrischen Feldes  $E_x$  liefert

$$\begin{aligned} jk_0 \sin(\theta) \sum_{\xi} E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} &= \dots \\ &= -\frac{1}{k_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma}\cdot\mathbf{r}} \left( \sum_{\xi} \left[ k_{\mathbf{G}_{\xi}}^x H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y - k_{\mathbf{G}_{\xi}}^y H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \right] e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} \right) \right] + jk_0 \sum_{\xi} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} . \\ &= -\frac{1}{k_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \sum_{\varsigma} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}}^{-1} \left[ k_{\mathbf{G}_{\xi}}^x H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y - k_{\mathbf{G}_{\xi}}^y H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \right] e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\xi}+\mathbf{G}_{\varsigma})\cdot\mathbf{r}} \right] + jk_0 \sum_{\xi} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Die Substitution  $\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma} = \mathbf{G}_{\gamma}$  entspricht einer Faltung zweier Summen, und mit der vereinfachten Darstellung  $\eta_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}} = \eta(\mathbf{G}_{\gamma} - \mathbf{G}_{\xi})$  folgt

$$\begin{aligned} jk_0 \sin(\theta) \sum_{\xi} E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} &= \dots \\ &= -\frac{1}{k_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \sum_{\gamma-\xi} \sum_{\xi} \eta_{(\mathbf{G}_{\gamma}-\mathbf{G}_{\xi})}^{-1} \left[ k_{\mathbf{G}_{\xi}}^x H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y - k_{\mathbf{G}_{\xi}}^y H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \right] e^{j(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\gamma})\cdot\mathbf{r}} \right] + jk_0 \sum_{\xi} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} . \\ &= -\frac{1}{k_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}}^{-1} \left[ k_{\mathbf{G}_{\xi}}^x H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y - k_{\mathbf{G}_{\xi}}^y H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \right] e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\gamma}}\cdot\mathbf{r}} \right] + jk_0 \sum_{\xi} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Der Index der Summe  $(\gamma - \xi) \in (-\infty, \infty)$  geht in  $\gamma \in (-\infty, \infty)$  über. Die Ableitung nach  $x$ , das Tauschen der Summationsindizes, Division der Gleichung durch  $e^{jk_{G_\xi} \cdot \mathbf{r}}$  und Multiplikation mit  $k_0$  liefert

$$k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} E_{G_\xi}^x = - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_\xi}^x \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} \left[ k_{G_\gamma}^x H_{G_\gamma}^y - k_{G_\gamma}^y H_{G_\gamma}^x \right] + k_0^2 \sum_{\xi} H_{G_\xi}^y. \quad (\text{A.26})$$

Die Herleitung für  $E_x$  ist äquivalent. Die magnetische Feldstärkenkomponente  $H_x$  ergibt sich durch das Einsetzen der Gl. (A.23) in Gl. (A.22)

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_x}{\partial z} &= \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \right] - jk_0 \varepsilon(\mathbf{r}) E_y \\ jk_0 \sin(\theta) \sum_{\xi} H_{G_\xi}^x e^{jk_{G_\xi} \cdot \mathbf{r}} &= \dots \\ &= \frac{1}{jk_0} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \sum_{\xi} \left[ k_{G_\xi}^x E_{G_\xi}^y - k_{G_\xi}^y E_{G_\xi}^x \right] e^{jk_{G_\xi} \cdot \mathbf{r}} \right] - jk_0 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{G_{\xi,\gamma}} E_{G_\xi}^y e^{j(\mathbf{k} + \mathbf{G}_\xi + \mathbf{G}_\gamma) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{jk_0} \sum_{\xi} k_{G_\xi}^x \left[ k_{G_\xi}^x E_{G_\xi}^y - k_{G_\xi}^y E_{G_\xi}^x \right] e^{jk_{G_\xi} \cdot \mathbf{r}} - jk_0 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{G_{\xi,\gamma}} E_{G_\gamma}^y e^{jk_{G_\xi} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Alle Komponenten lauten

$$\begin{aligned} k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} E_{G_\xi}^x &= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_\xi}^x \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} \left[ k_{G_\gamma}^x H_{G_\gamma}^y - k_{G_\gamma}^y H_{G_\gamma}^x \right] + k_0^2 \sum_{\xi} H_{G_\xi}^y \\ k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} E_{G_\xi}^y &= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_\xi}^y \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} \left[ k_{G_\gamma}^x H_{G_\gamma}^y - k_{G_\gamma}^y H_{G_\gamma}^x \right] - k_0^2 \sum_{\xi} H_{G_\xi}^x \\ k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} H_{G_\xi}^x &= \sum_{\xi} k_{G_\xi}^x \left[ k_{G_\xi}^x E_{G_\xi}^y - k_{G_\xi}^y E_{G_\xi}^x \right] - k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{G_{\xi,\gamma}} E_{G_\gamma}^y \\ k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} H_{G_\xi}^y &= \sum_{\xi} k_{G_\xi}^y \left[ k_{G_\xi}^x E_{G_\xi}^y - k_{G_\xi}^y E_{G_\xi}^x \right] + k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{G_{\xi,\gamma}} E_{G_\gamma}^x \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Dies stellt ein hoch komplexes  $[4N, 4N]$  Eigenwertsystem dar. Wobei  $N$  der Anzahl der ebenen Wellen entspricht. Dieses wird mit Gl. (A.29) in ein  $[2N, 2N]$  Eigenwertproblem überführt.

$$\begin{aligned}
\left[ \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^y - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^x \right] &= \mathbf{u}_\xi & \left[ \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\gamma}^x \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\gamma}^y - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\gamma}^y \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\gamma}^x \right] &= \mathbf{u}_\gamma \\
\left[ \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^y - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^x \right] &= \mathbf{v}_\xi & \left[ \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\gamma}^x \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^y - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\gamma}^y \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^x \right] &= \mathbf{v}_\gamma
\end{aligned} \tag{A.29}$$

Aus Gl. (A.28) folgt nach Substitution

$$k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^x = - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}^{-1} \mathbf{u}_\gamma + k_0^2 \sum_{\xi} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^y \tag{A.30}$$

$$k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^y = - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}^{-1} \mathbf{u}_\gamma - k_0^2 \sum_{\xi} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^x \tag{A.31}$$

$$k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^x = \sum_{\xi} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \mathbf{v}_\xi - k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^y \tag{A.32}$$

$$k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_\xi}^y = \sum_{\xi} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \mathbf{v}_\xi + k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^x . \tag{A.33}$$

Gleichung (A.30) und Gl. (A.31) werden mit  $\sin(\theta)$  multipliziert, Gl. (A.33) in Gl. (A.30) und Gl. (A.32) in Gl. (A.31) eingesetzt.

$$\begin{aligned}
k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^x - k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^x &= - \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}^{-1} \mathbf{u}_\gamma + \sum_{\xi} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \mathbf{v}_\xi \\
k_0^2 \sin(\theta) \sum_{\xi} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^y - k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_\gamma}^y &= - \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y \eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}^{-1} \mathbf{u}_\gamma - \sum_{\xi} \mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x \mathbf{v}_\xi
\end{aligned} \tag{A.34}$$

Die Komponenten  $\eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}}$  sind Elemente einer reellen Hermite-Matrix. Die periodische dielektrische Struktur  $\varepsilon(\mathbf{r})$  ist in fast allen Fällen gerade und somit die Fourier-Koeffizienten reell. Die Transponierte einer reellen Hermite-Matrix ist die Matrix selbst. Es gilt  $\eta_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} = \eta_{\mathbf{G}_{\gamma,\xi}}$ . Nach Tauschen einiger Summationsindizes, Multiplikation mit  $\sin^2(\theta) - \eta_{\mathbf{G}_{\gamma,\xi}} = \mathbf{M}$ , Multiplikation mit  $\mathbf{M}^{-1}$  und die erste Gleichung  $\mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^x$  wird mit  $\mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^y$  und die zweite Gleichung  $\mathbf{E}_{\mathbf{G}_\xi}^y$  mit  $\mathbf{k}_{\mathbf{G}_\xi}^x$  multipliziert, folgt

$$\begin{aligned}
k_0^2 \sum_{\xi} k_{G_{\xi}}^y E_{G_{\xi}}^x &= \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^y M^{-1} k_{G_{\gamma}}^y v_{\gamma} - \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^y M^{-1} k_{G_{\xi}}^x \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} u_{\gamma} \\
k_0^2 \sum_{\xi} k_{G_{\xi}}^x E_{G_{\xi}}^y &= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^x M^{-1} k_{G_{\gamma}}^x v_{\gamma} - \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^x M^{-1} k_{G_{\xi}}^y \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} u_{\gamma}
\end{aligned} \quad (A.35)$$

Die Subtraktion beider Gleichungen und der Substitution für das elektrische Feld aus Gl. (A.29) folgt mit  $Q^y = k_{G_{\xi}}^y \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1}$  und  $Q^x = k_{G_{\xi}}^x \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1}$

$$k_0^2 \sum_{\xi} v_{\xi} = - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} (\mathbf{k}_{G_{\xi}} \cdot \mathbf{k}_{G_{\gamma}}) M^{-1} v_{\gamma} - \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} (k_{G_{\xi}}^x M^{-1} Q^y - k_{G_{\xi}}^y M^{-1} Q^x) u_{\gamma} \quad (A.36)$$

Die zweite Gleichung ergibt sich ebenfalls aus Gl. (A.30) bis Gl. (A.33). Die beiden Gleichungen für die magnetischen Felder  $H_G^x$ ,  $H_G^y$  werden mit  $\sin(\theta)$  und die des elektrischen Feldes mit  $\eta_{G_{\xi,\gamma}}$  multipliziert. Die Gl. (A.30), Gl. (A.31) werden in Gl. (A.32), Gl. (A.33) eingesetzt, und mit der Definition für  $M$  und den Definitionen nach Gl. (A.29) folgt

$$\begin{aligned}
k_0^2 \sum_{\xi} k_{G_{\xi}}^y H_{G_{\xi}}^x &= \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^y M^{-1} k_{G_{\gamma}}^x v_{\gamma} + \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^y M^{-1} \eta_{G_{\xi,\gamma}} k_{G_{\xi}}^y \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} u_{\gamma} \\
k_0^2 \sum_{\xi} k_{G_{\xi}}^x H_{G_{\xi}}^y &= \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^x M^{-1} k_{G_{\gamma}}^y v_{\gamma} - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} k_{G_{\xi}}^x M^{-1} \eta_{G_{\xi,\gamma}} k_{G_{\xi}}^x \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} u_{\gamma}
\end{aligned} \quad (A.37)$$

Die Subtraktion beider Gleichungen liefert

$$\begin{aligned}
k_0^2 \sum_{\xi} u_{\xi} &= \sin(\theta) \sum_{\xi} \sum_{\gamma} (k_{G_{\xi}}^x k_{G_{\gamma}}^y - k_{G_{\xi}}^y k_{G_{\gamma}}^x) M^{-1} v_{\gamma} - \dots \\
&\quad - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} (k_{G_{\xi}}^x M^{-1} \eta_{G_{\xi,\gamma}} Q^x + k_{G_{\xi}}^y M^{-1} \eta_{G_{\xi,\gamma}} Q^y) u_{\gamma}
\end{aligned} \quad (A.38)$$

Gleichung (A.36) und Gl. (A.38) stellen ein  $[2N, 2N]$  Eigenwertproblem dar. Die Gleichungen werden in eine Matrix überführt und mit der Umformung

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}^{-1} \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} &= \mathbf{M}^{-1} \left( \sin^2(\theta) \mathbf{I} + \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} - \sin^2(\theta) \mathbf{I} \right) \\
&= -\mathbf{M}^{-1} \left( \mathbf{M} - \sin^2(\theta) \mathbf{I} \right) \\
&= \sin^2(\theta) \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{I}
\end{aligned} \tag{A.39}$$

und den Substitutionen

$$\begin{aligned}
\mathbf{M} &= \sin^2(\theta) \mathbf{I} - \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \\
\mathbf{P} &= \sin^2(\theta) \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{I} \\
\mathbf{Q}^x &= \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}}^{-1} \\
\mathbf{Q}^y &= \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}}^{-1}
\end{aligned} \tag{A.40}$$

folgt die Eigenwertgleichung

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} \\ \mathbf{T}_{21} & \mathbf{T}_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\gamma} \\ \mathbf{u}_{\gamma} \end{pmatrix} = \mathbf{k}_0^2 \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\xi} \\ \mathbf{u}_{\xi} \end{pmatrix} \tag{A.41}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}_{11} &= -\mathbf{M}^{-1} \left( \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \bullet \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\gamma}} \right) \\
\mathbf{T}_{12} &= -\sin(\theta) \left[ \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \left( \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q}^y \right) - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \left( \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q}^x \right) \right] \\
\mathbf{T}_{21} &= \sin(\theta) \mathbf{M}^{-1} \left( \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x \right) \\
\mathbf{T}_{22} &= -\mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \left( \mathbf{P} \mathbf{Q}^x \right) - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \left( \mathbf{P} \mathbf{Q}^y \right)
\end{aligned} \tag{A.42}$$

Für den Spezialfall, dass  $\theta = 0$  ist, folgt unmittelbar das entkoppelte Eigenwertproblem

$$\begin{pmatrix} \left( \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}} \bullet \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\gamma}} \right) \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \left( \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x - \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \mathbf{k}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \right) \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\gamma} \\ \mathbf{u}_{\gamma} \end{pmatrix} = \mathbf{k}_0^2 \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\xi} \\ \mathbf{u}_{\xi} \end{pmatrix}, \tag{A.43}$$

mit  $\mathbf{u} = |\mathbf{k}_{\mathbf{G}} \bullet \mathbf{k}_{\mathbf{G}}| \mathbf{w}$

$$\begin{aligned}
& \left| \mathbf{k}_{G_\xi} \cdot \mathbf{k}_{G_\xi} \right| \left| \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} \right| \left| \mathbf{k}_{G_\gamma} \cdot \mathbf{k}_{G_\gamma} \right| \mathbf{w}_\gamma = \mathbf{k}_0^2 \mathbf{w}_\xi \\
& \left( \mathbf{k}_{G_\xi} \cdot \mathbf{k}_{G_\xi} \right) \eta_{G_{\xi,\gamma}}^{-1} \mathbf{v}_\gamma = \mathbf{k}_0^2 \mathbf{v}_\xi
\end{aligned} \tag{A.44}$$

Dies ist das bekannte Ergebnis für die Berechnung photonischer Kristalle im entkoppelten zweidimensionalen Fall [31, 32, 130, 131].

## A.4 Photonische Wellenleiter

### A.4.1 Ebene Wellenmethode für das transversale Feld

Die transversale Wellengleichung [69, 72, 73] für das elektrische Feld  $\mathbf{E}_t$  mit dem ortsabhängigen Brechungsindex  $n(\mathbf{r})=n$  ist gegeben durch

$$\left( \nabla_t^2 + k_0^2 n^2 \right) \mathbf{E}_t + \nabla_t \left[ \mathbf{E}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \right] = \beta^2 \mathbf{E}_t \tag{A.45}$$

und dem magnetische Feld  $\mathbf{H}$

$$\left( \nabla_t^2 + k_0^2 n^2 \right) \mathbf{H}_t + \nabla_t \ln(n^2) \times [\nabla_t \times \mathbf{H}_t] = \beta^2 \mathbf{H}_t \tag{A.46}$$

mit dem periodischen Brechungsindex  $n(\mathbf{r})=n$

$$\begin{aligned}
n^2 &= \sum_{\varsigma} \eta_{G_\varsigma} e^{j\mathbf{G}_\varsigma \cdot \mathbf{r}} \\
\ln(n^2) &= \sum_{\varsigma} \kappa_{G_\varsigma} e^{j\mathbf{G}_\varsigma \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned} \tag{A.47}$$

mit

$$\begin{aligned}
\nabla_t e^{j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} &= j \left( G^x \hat{\mathbf{e}}_x + G^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \\
\nabla_t^2 e^{j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} &= -|\mathbf{G}|^2 e^{j\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned} \tag{A.48}$$

### A.4.1.1 Elektrische Feld E

Die modale Expansion des transversalen elektrischen Feldes  $\mathbf{v}_t$  ist definiert nach [73] mit

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_t &= \sum_{\xi} E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_x + \sum_{\mathbf{G}} E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_y \\ &= \sum_{\xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\quad (\text{A.49})$$

wobei  $\hat{\mathbf{e}}_{x,y}$  den Einheitsvektoren entlang der x- und y-Achse entsprechen. Das Einsetzen der Gl. (A.47) und Gl. (A.49) in die Gl. (A.45) ergibt für den ersten Term

$$\begin{aligned}\nabla_t^2 \mathbf{E}_t &= \nabla_t^2 \sum_{\xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \\ &= - \sum_{\xi} |\mathbf{G}_{\xi}|^2 \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}.\end{aligned}\quad (\text{A.50})$$

Nach dem Einsetzen des modalen Feldes und der Fourier-Transformation für  $\varepsilon(\mathbf{r})$  mit der Substitution  $\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma} = \mathbf{G}_{\gamma}$ ,  $\eta_{\mathbf{G}_{\xi}, \gamma} = \eta(\mathbf{G}_{\xi} - \mathbf{G}_{\gamma})$  und Tauschen der Summationsgrenzen folgt für den zweiten Term

$$\begin{aligned}n^2 k_0^2 \mathbf{E}_t &= k_0^2 \sum_{\varsigma} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\varsigma} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\varsigma}} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j(\mathbf{G}_{\varsigma} + \mathbf{G}_{\xi}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma}, \xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\gamma} \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi}, \gamma} \left( E_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\quad (\text{A.51})$$

Der dritte Term ergibt



$$\begin{aligned}
\nabla_t \left[ \mathbf{E}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \right] &= \nabla_t \left[ \sum_{\xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \cdot \nabla_t \sum_{\varsigma} \kappa_{\mathbf{G}_{\varsigma}} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \right] \\
&= \nabla_t \left[ \sum_{\xi} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \cdot \sum_{\varsigma} j\mathbf{G}_{\varsigma} \kappa_{\mathbf{G}_{\varsigma}} e^{j\mathbf{G}_{\varsigma} \cdot \mathbf{r}} \right]. \quad (\text{A.52}) \\
&= \nabla_t \sum_{\xi} \sum_{\varsigma} j\kappa_{\mathbf{G}_{\varsigma}} \left( E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x G_{\varsigma}^x + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y G_{\varsigma}^y \right) e^{j(\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma}) \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned}$$

Die Substitution  $\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\varsigma} = \mathbf{G}_{\gamma}$  und das Tauschen der Summationsgrenzen liefern

$$\begin{aligned}
\nabla_t \left[ \mathbf{E}_t \cdot \nabla_t \ln(n^2) \right] &= \nabla_t \sum_{\xi} \sum_{\gamma} j\kappa_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}} \left[ E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x (G_{\gamma}^x - G_{\xi}^x) + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y (G_{\gamma}^y - G_{\xi}^y) \right] e^{j\mathbf{G}_{\gamma} \cdot \mathbf{r}} \\
&= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \left( G_{\gamma}^x \hat{\mathbf{e}}_x + G_{\gamma}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) \kappa_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}} \left[ E_{\mathbf{G}_{\xi}}^x (G_{\gamma}^x - G_{\xi}^x) + E_{\mathbf{G}_{\xi}}^y (G_{\gamma}^y - G_{\xi}^y) \right] e^{j\mathbf{G}_{\gamma} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{A.53}) \\
&= - \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \left( G_{\xi}^x \hat{\mathbf{e}}_x + G_{\xi}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) \kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left[ E_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x (G_{\xi}^x - G_{\gamma}^x) + E_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y (G_{\xi}^y - G_{\gamma}^y) \right] e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}
\end{aligned}$$

Sortieren der Komponenten nach den Feldkomponenten  $E^{x,y}$  und Einheitsvektoren  $\hat{\mathbf{e}}_{x,y}$  liefert in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m}_{11} & \mathbf{m}_{12} \\ \mathbf{m}_{21} & \mathbf{m}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x \\ \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y \end{pmatrix} = \boldsymbol{\beta}^2 \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \\ \mathbf{E}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \end{pmatrix} \quad (\text{A.54})$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}_{11} &= k_0^2 \eta_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} - \left| \mathbf{G}_{\xi} \right|^2 \mathbf{I} - \kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^x - \mathbf{G}_{\gamma}^x \right) \mathbf{G}_{\xi}^x \\
\mathbf{m}_{12} &= -\kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^x - \mathbf{G}_{\gamma}^x \right) \mathbf{G}_{\xi}^y \\
\mathbf{m}_{21} &= -\kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^y - \mathbf{G}_{\gamma}^y \right) \mathbf{G}_{\xi}^x \\
\mathbf{m}_{22} &= k_0^2 \eta_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} - \left| \mathbf{G}_{\xi} \right|^2 \mathbf{I} - \kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^y - \mathbf{G}_{\gamma}^y \right) \mathbf{G}_{\xi}^y \quad (\text{A.55})
\end{aligned}$$

Gleichung (A.54) wird für eine feste Wellenlänge  $\lambda$  mit  $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda$  gelöst und stellt ein gewöhnliches Eigenwertproblem dar, mit  $\mathbf{G}_{\xi, \gamma} = \mathbf{G}_{\xi} - \mathbf{G}_{\gamma}$  und  $\mathbf{I}$  der Einheitsmatrix.

### A.4.1.2 Magnetische Feld H

Die modale Expansion des magnetischen Feldes

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_t &= \sum_{\xi} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_x + \sum_{\mathbf{G}} H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_y \\ &= \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Das Einsetzen des periodischen Brechungsindex  $n(\mathbf{r})$  aus Gl. (A.47) und des modalen Feldes nach Gl. (A.56) in die transversale Wellengleichung Gl. (A.46) liefert für den ersten Term

$$\begin{aligned} \nabla_t^2 \mathbf{H}_t &= \nabla_t^2 \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \\ &= - \sum_{\xi} |\mathbf{G}_{\xi}|^2 \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

Der zweite Term ergibt sich aus

$$\begin{aligned} k_0^2 n^2 \mathbf{H}_t &= k_0^2 \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\xi}} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j(\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\xi}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\gamma} \sum_{\xi} \eta_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\gamma} \cdot \mathbf{r}} \\ &= k_0^2 \sum_{\xi} \sum_{\gamma} \eta_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( H_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

und der Dritte zu

$$\nabla_t \ln(n^2) \times [\nabla_t \times \mathbf{H}_t] = \nabla_t \sum_{\xi} \kappa_{\mathbf{G}_{\xi}} e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \times \left[ \nabla_t \times \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \right], \quad (\text{A.59})$$

mit der Vektoridentität  $\nabla \times (\phi \mathbf{a}) = \phi \nabla \times \mathbf{a} + (\nabla \phi) \times \mathbf{a}$  folgt

$$\begin{aligned}
 \nabla_t \ln(n^2) \times [\nabla_t \times \mathbf{H}_t] &= \nabla_t \sum_{\zeta} \kappa_{\mathbf{G}_{\zeta}} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \times \left[ \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) \times \nabla_t e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \right] \\
 &= -\nabla_t \sum_{\zeta} \kappa_{\mathbf{G}_{\zeta}} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \times \left[ \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \hat{\mathbf{e}}_x + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \hat{\mathbf{e}}_y \right) \times j\mathbf{G}_{\xi} e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\text{A.60}) \\
 &= \sum_{\zeta} \mathbf{G}_{\zeta} \kappa_{\mathbf{G}_{\zeta}} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \times \left[ \sum_{\xi} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \mathbf{G}_{\xi}^y + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \mathbf{G}_{\xi}^x \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \right] \hat{\mathbf{e}}_z
 \end{aligned}$$

Das Auflösen der Rotation mit

$$\mathbf{G}_{\zeta} e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} \times e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_z = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ 0 & 0 & e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}} \\ G_{\zeta}^x e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} & G_{\zeta}^y e^{j\mathbf{G}_{\zeta} \cdot \mathbf{r}} & 0 \end{pmatrix} = -\left( G_{\zeta}^y \hat{\mathbf{e}}_x - G_{\zeta}^x \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j(\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\zeta}) \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{A.61})$$

folgt

$$\begin{aligned}
 \nabla_t \ln(n^2) \times [\nabla_t \times \mathbf{H}_t] &= \dots \\
 &= -\sum_{\zeta} \sum_{\xi} \kappa_{\mathbf{G}_{\zeta}} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x G_{\zeta}^y + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y G_{\zeta}^x \right) \left( G_{\zeta}^y \hat{\mathbf{e}}_x - G_{\zeta}^x \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j(\mathbf{G}_{\xi} + \mathbf{G}_{\zeta}) \cdot \mathbf{r}} \\
 &= -\sum_{\gamma} \sum_{\xi} \kappa_{\mathbf{G}_{\gamma, \xi}} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x G_{\xi}^y + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y G_{\xi}^x \right) \left( (G_{\gamma}^y - G_{\xi}^y) \hat{\mathbf{e}}_x - (G_{\gamma}^x - G_{\xi}^x) \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\gamma} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{A.62}) \\
 &= -\sum_{\xi} \sum_{\gamma} \kappa_{\mathbf{G}_{\xi, \gamma}} \left( H_{\mathbf{G}_{\xi}}^x G_{\xi}^y + H_{\mathbf{G}_{\xi}}^y G_{\xi}^x \right) \left( (G_{\xi}^y - G_{\gamma}^y) \hat{\mathbf{e}}_x - (G_{\xi}^x - G_{\gamma}^x) \hat{\mathbf{e}}_y \right) e^{j\mathbf{G}_{\xi} \cdot \mathbf{r}}
 \end{aligned}$$

Sortieren der Komponenten nach den Feldkomponenten  $H^{x,y}$  und Einheitsvektoren  $\hat{\mathbf{e}}_{x,y}$  liefert in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m}_{11} & \mathbf{m}_{12} \\ \mathbf{m}_{21} & \mathbf{m}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^x \\ \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\gamma}}^y \end{pmatrix} = \beta^2 \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\xi}}^x \\ \mathbf{H}_{\mathbf{G}_{\xi}}^y \end{pmatrix} \quad (\text{A.63})$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}_{11} &= k_0^2 \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} - \left| \mathbf{G}_{\xi} \right|^2 \mathbf{I} + \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^y - \mathbf{G}_{\gamma}^y \right) \mathbf{G}_{\gamma}^y \\
\mathbf{m}_{12} &= -\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^y - \mathbf{G}_{\gamma}^y \right) \mathbf{G}_{\gamma}^x \\
\mathbf{m}_{21} &= -\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^x - \mathbf{G}_{\gamma}^x \right) \mathbf{G}_{\gamma}^y \\
\mathbf{m}_{22} &= k_0^2 \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} - \left| \mathbf{G}_{\xi} \right|^2 \mathbf{I} + \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{G}_{\xi,\gamma}} \left( \mathbf{G}_{\xi}^x - \mathbf{G}_{\gamma}^x \right) \mathbf{G}_{\gamma}^x
\end{aligned} \tag{A.64}$$

Gleichung (A.63) wird für eine feste Wellenlänge  $\lambda$  mit  $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda$  gelöst, mit  $\mathbf{G}_{\xi,\gamma} = \mathbf{G}_{\xi} - \mathbf{G}_{\gamma}$  und  $\mathbf{I}$  der Einheitsmatrix.

#### A.4.2 Hermite-Gauß-Basisfunktionen

Die Grundfunktionen sind die normierten Hermite-Gauß-Funktionen. Diese sind gegeben durch

$$\Psi_n^s := \Psi_n(s) = \frac{2^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{n! \sigma_s} \sqrt{\pi}} e^{-\frac{s^2}{2\sigma_s^2}} H_n \left( \frac{s}{\sigma_s} \right). \tag{A.65}$$

$H_n$  sind Hermite-Gauß-Funktionen die in Abschnitt A.5.2 definiert sind. Für eine kompakte Schreibweise gelten folgende Beziehungen

$$\begin{aligned}
H_n^s &= H_n \left( \frac{s}{\sigma_s} \right) \\
\Omega &= \frac{n\pi\sigma_s}{l_s}
\end{aligned} \tag{A.66}$$

Wobei  $s$  ein allgemeiner Ausdruck ist und entsprechend den Integralen durch  $x$  und  $y$  ersetzt wird.

##### A.4.2.1 Grundintegrale

Für die Lösung der transversalen Wellengleichung werden einige Grundintegrale benötigt. Diese werden im Folgenden aufgezeigt

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^x \Psi_m^y \nabla_t^2 [\Psi_q^x \Psi_p^y] dx dy \\
&= \frac{2^{\frac{n+m+q+p}{2}}}{\pi \sigma_x \sigma_y \sqrt{n!m!q!p!}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} H_n^x e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} H_m^y \nabla_t^2 \left[ e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} H_q^x e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} H_p^y \right] dx dy
\end{aligned} \tag{A.67}$$

mit Hilfe von Gl. (A.108) wird der Laplace Operator aufgelöst.

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(1)} &= \frac{2^{\frac{n+m+q+p}{2}}}{\pi \sigma_x \sigma_y \sqrt{n!m!q!p!}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{\sigma_y^2}} H_n^x H_m^y \left[ \dots \right. \\
&\quad \frac{4q(q-1)}{4\sigma_x^2} H_{q-2}^x H_p^y - \frac{2(2q-1)}{4\sigma_x^2} H_q^x H_p^y + \frac{1}{4\sigma_x^2} H_{q+2}^x H_p^y + \dots \\
&\quad \left. + \frac{4p(p-1)}{4\sigma_y^2} H_q^x H_{p-2}^y - \frac{2(2p-1)}{4\sigma_y^2} H_q^x H_p^y + \frac{1}{4\sigma_y^2} H_q^x H_{p+2}^y \right] dx dy
\end{aligned} \tag{A.68}$$

Die einzelnen Integrale werden mit der Orthogonalitätsbedingung Gl. (A.101) gelöst.

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(12),x} &= -\frac{2n+1}{2\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+q}{2}}}{\sigma_x \sqrt{\pi n!q!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\sigma_x^2}} H_n^x H_q^x dx \frac{2^{\frac{m+p}{2}}}{\sigma_y \sqrt{\pi m!p!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{\sigma_y^2}} H_m^y H_p^y dy \\
&= -\frac{2n+1}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q} \delta_{m,p}
\end{aligned} \tag{A.69}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(11),x} &= \frac{n(n-1)}{\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+q}{2}}}{\sigma_x \sqrt{\pi n!q!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\sigma_x^2}} H_n^x H_{q-2}^x dx \\
&= \frac{n(n-1)}{\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+q}{2}}}{\sigma_x \sqrt{\pi n!q!}} \sigma_x \sqrt{\pi} 2^q q! = \frac{n(n-1)}{\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+(n-2)}{2}}}{\sqrt{n!(n-2)!}} 2^{(n-2)} (n-2)! \\
&= \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q-2} \delta_{m,p}
\end{aligned} \tag{A.70}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(13),x} &= \frac{1}{4\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+q}{2}}}{\sigma_x \sqrt{\pi n!q!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\sigma_x^2}} H_n^x H_{q+2}^x dx \\
&= \frac{1}{4\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+q}{2}}}{\sigma_x \sqrt{\pi n!q!}} \sigma_x \sqrt{\pi} 2^q q! = \frac{1}{2\sigma_x^2} \frac{2^{\frac{n+(n+2)}{2}}}{\sqrt{n!(n+2)!}} 2^{(n+2)} (n+2)! \\
&= \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q+2} \delta_{m,p}
\end{aligned} \tag{A.71}$$

Die Lösungen für die y Komponenten sind äquivalent und es folgt

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q,p}^{(1)} &= \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q-2} \delta_{m,p} - \frac{2n+1}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q} \delta_{m,p} + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2\sigma_x^2} \delta_{n,q+2} \delta_{m,p} + \dots \\
&+ \frac{\sqrt{m(m-1)}}{2\sigma_y^2} \delta_{n,q} \delta_{m,p-2} - \frac{2m+1}{2\sigma_y^2} \delta_{n,q} \delta_{m,p} + \frac{\sqrt{(m+1)(m+2)}}{2\sigma_y^2} \delta_{n,q} \delta_{m,p+2}
\end{aligned} \tag{A.72}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(2),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right) \Psi_m^s \Psi_q^s ds \\
&= \frac{2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s \sqrt{m!q!} \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi ns}{l_s}\right) e^{-\frac{s^2}{\sigma_s^2}} H_m^s H_q^s ds
\end{aligned} \tag{A.73}$$

$$I_{n,m,q}^{(2),s} = \begin{cases} 1 & , n = 0; \quad q = m \\ (-1)^{\frac{q-m}{2}} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} \Omega^{q-m} e^{-\Omega^2} L_m^{q-m}(2\Omega^2) & , n \neq 0; \quad \frac{q-m}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \tag{A.74}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(3),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial s} \left[ \cos \left( \frac{2\pi n s}{l_s} \right) \right] \frac{\partial}{\partial s} [\Psi_m^s] \Psi_q^s ds \\
&= -\frac{\pi n 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 l_s \sqrt{m!q!} \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \left( \frac{2\pi n s}{l_s} \right) e^{\frac{s^2}{\sigma_s^2}} [2mH_{m-1}^s - H_{m+1}^s] H_q^s ds \\
&= -\frac{\pi n 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 l_s \sqrt{m!q!} \pi} [I_{n,m,q}^{(31),s} - I_{n,m,q}^{(32),s}]
\end{aligned} \tag{A.75}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(31),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \sin \left( \frac{2\pi n s}{l_s} \right) e^{\frac{s^2}{\sigma_s^2}} H_{m-1}^s H_q^s ds \\
&= 2m(-1)^{\frac{q-m}{2}} 2^{m-1} (m-1)! \sqrt{\pi} \frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^{q-m+1}}{\left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^{q-m+2}} e^{\frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^2}{4 \left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^2}} L_{m-1}^{q-m+1} \left( \frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^2}{2 \left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^2} \right) \\
&= 2\sigma_s \sqrt{\pi} (-1)^{\frac{q-m}{2}} 2^q m! \Omega^{q-m+1} e^{-\Omega^2} L_{m-1}^{q-m+1} (2\Omega^2)
\end{aligned} \tag{A.76}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(32),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \sin \left( \frac{2\pi n s}{l_s} \right) e^{\frac{s^2}{\sigma_s^2}} H_{m+1}^s H_q^s ds \\
&= 2m(-1)^{\frac{q-m-2}{2}} 2^{m+1} (m+1)! \sqrt{\pi} \frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^{q-m-1}}{\left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^{q-m}} e^{\frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^2}{4 \left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^2}} L_{m+1}^{q-m-1} \left( \frac{\left( \frac{2\pi n}{l_s} \right)^2}{2 \left( \frac{1}{\sigma_s} \right)^2} \right) \\
&= -\sigma_s \sqrt{\pi} (-1)^{\frac{q-m}{2}} 2^q (m+1)! \Omega^{q-m-1} e^{-\Omega^2} L_{m+1}^{q-m-1} (2\Omega^2)
\end{aligned} \tag{A.77}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(3),s} &= -\frac{\pi n 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 l_s \sqrt{m!q!}\pi} \left[ I_{n,m,q}^{(31),s} - I_{n,m,q}^{(32),s} \right] \\
&= \begin{cases} -\frac{n\pi}{\sigma_s l_s} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} (-1)^{\frac{q-m}{2}} \Omega^{q-m} e^{-\Omega^2} [\dots \\ 2\Omega L_{m-1}^{q-m+1}(2\Omega^2) + \frac{m+1}{\Omega} L_{m+1}^{q-m-1}(2\Omega^2) \end{cases} & , n \neq 0; \quad \frac{q-m}{2} \in \mathbb{Z} \\
&0 & , \text{sonst}
\end{aligned} \tag{A.78}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(41),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial s} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) \Psi_m^s \Psi_q^s ds \\
&= -\frac{2\pi 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s l_s \sqrt{m!q!}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sin\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) e^{\frac{s^2}{\sigma_s^2}} H_m^s H_q^s ds \\
&= -\frac{2\pi 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s l_s \sqrt{m!q!}\pi} (-1)^{\frac{q-m-1}{2}} 2^m m! \sqrt{\pi} \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^{q-m}}{\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^{q-m+1}} e^{\frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{4\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2}} L_m^{q-m} \left( \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{2\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2} \right)
\end{aligned} \tag{A.79}$$

$$I_{n,m,q}^{(41),s} = \begin{cases} \frac{2\pi n}{l_s} (-1)^{\frac{q-m+1}{2}} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} \Omega^{q-m} e^{-\Omega^2} L_m^{q-m}(2\Omega^2) & , n \neq 0; \quad \frac{q-m-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \tag{A.80}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(42),s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial s} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) \Psi_q^s \Psi_m^s ds \\
&= \frac{2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s \sqrt{m!q!}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{s^2}{\sigma_s^2}} \left[ -\frac{2\pi n}{l_s} \sin\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) H_q^s + \dots \right. \\
&\quad \left. + \frac{q}{\sigma_s} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) H_{q-1}^s - \frac{2}{\sigma_s} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) H_{q+1}^s \right] H_m^s ds \\
&= I_{n,m,q}^{(41),s} + I_{n,m,q}^{(421),s} - I_{n,m,q}^{(422),s}
\end{aligned} \tag{A.81}$$



$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(421),s} &= \frac{q 2^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 \sqrt{m!q!}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{\sigma_s^2}} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) H_m^s H_{q-1}^s ds \\
&= \frac{22^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 \sqrt{m!q!}\pi} (-1)^{\frac{q-m-1}{2}} 2^m m! \sqrt{\pi} \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^{q-m-1}}{\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^{q-m}} e^{-\frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{4\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2}} L_m^{q-m-1} \left( \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{2\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2} \right) \\
&= \begin{cases} \frac{1}{\sigma_s} \sqrt{\frac{m+1}{2}} & , n \neq 0; \quad q-1=m \\ \frac{q}{2\sigma_s} (-1)^{\frac{q-m-1}{2}} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} \Omega^{q-m-1} e^{-\Omega^2} L_m^{q-m-1}(2\Omega^2) & , n \neq 0; \quad \frac{q-m-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.82})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(422),s} &= \frac{22^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 \sqrt{m!q!}\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{\sigma_s^2}} \cos\left(\frac{2\pi n s}{l_s}\right) H_m^s H_{q+1}^s ds \\
&= \frac{22^{\frac{m+q}{2}}}{\sigma_s^2 \sqrt{m!q!}\pi} (-1)^{\frac{q-m+1}{2}} 2^m m! \sqrt{\pi} \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^{q-m+1}}{\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^{q-m+2}} e^{-\frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{4\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2}} L_m^{q-m+1} \left( \frac{\left(\frac{2\pi n}{l_s}\right)^2}{2\left(\frac{1}{\sigma_s}\right)^2} \right) \\
&= \begin{cases} \frac{1}{\sigma_s} \sqrt{\frac{m}{2}} & , n \neq 0; \quad q+1=m \\ \frac{1}{\sigma_s} (-1)^{\frac{q-m+1}{2}} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} \Omega^{q-m+1} e^{-\Omega^2} L_m^{q-m+1}(2\Omega^2) & , n \neq 0; \quad \frac{q-m+1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.83})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{n,m,q}^{(42),s} &= \dots \\
&= \begin{cases} \frac{1}{\sigma_s} \sqrt{\frac{m}{2}} & , n \neq 0; \quad q+1=m \\ \frac{1}{\sigma_s} \sqrt{\frac{m+1}{2}} & , n \neq 0; \quad q-1=m \\ (-1)^{\frac{q-m+1}{2}} \sqrt{\frac{2^q m!}{2^m q!}} \Omega^{q-m} e^{-\Omega^2} \left[ -\frac{2\pi n}{l_s} L_m^{q-m}(2\Omega^2) - \dots \right. \\ \quad \left. -\frac{q}{2\Omega\sigma_s} L_m^{q-m-1}(2\Omega^2) - \frac{\Omega}{\sigma_s} L_m^{q-m+1}(2\Omega^2) \right] & , n \neq 0; \quad \frac{q-m-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (A.84)
\end{aligned}$$

#### A.4.2.2 Effektive Fläche $A_{\text{eff}}$

$$A_{\text{eff}} = \frac{A_{\text{eff}_1}^2}{A_{\text{eff}_2}} = \frac{\left( \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^2 dx dy \right)^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^4 dx dy} \quad (A.85)$$

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}_1} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^2 dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} g_{q_1, p_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \right|^2 dx dy \quad (A.86)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}_1} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \left( \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \right)^2 + \left( \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} g_{q_1, p_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \right)^2 + \dots \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x g_{q_1, p_1}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \right] dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \left( g_{n_1, m_1}^x \right)^2 \Psi_{n_1}^{x^2} \Psi_{m_1}^{y^2} + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \left( g_{q_1, p_1}^y \right)^2 \Psi_{q_1}^{x^2} \Psi_{p_1}^{y^2} + \dots \right. \\
&\quad + \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x g_{n_2, m_2}^x \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{n_2}^x \Psi_{m_2}^y \delta_{n_1 \neq n_2} \delta_{m_1 \neq m_2} + \dots \\
&\quad + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} g_{q_1, p_1}^y g_{q_2, p_2}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \Psi_{q_2}^x \Psi_{p_2}^y \delta_{q_1 \neq q_2} \delta_{p_1 \neq p_2} + \dots \\
&\quad \left. + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x g_{q_1, p_1}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \right] dx dy
\end{aligned} \tag{A.87}$$

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}_1} &= \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left( g_{n_1, m_1}^x \right)^2 \Psi_{n_1}^{x^2} \Psi_{m_1}^{y^2} dx dy + \dots \\
&\quad + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left( g_{q_1, p_1}^y \right)^2 \Psi_{q_1}^{x^2} \Psi_{p_1}^{y^2} dx dy + \dots \\
&\quad + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_{n_1, m_1}^x g_{q_1, p_1}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y dx dy \\
&= \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \left[ \left( g_{n_1, m_1}^x \right)^2 + \left( g_{n_1, m_1}^y \right)^2 \right] + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} g_{n_1, m_1}^x g_{q_1, p_1}^y \delta_{n_1, q_1} \delta_{m_1, p_1} \\
&= \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \left[ \left( g_{n_1, m_1}^x \right)^2 + \left( g_{n_1, m_1}^y \right)^2 + 2 g_{n_1, m_1}^x g_{n_1, m_1}^y \right]
\end{aligned} \tag{A.88}$$

Die Gleichung reduziert sich für den Fall der Opposite parity, da  $n_1$  immer ungleich  $q_1$  und  $m_1$  ungleich  $p_1$  sind. Es folgt

$$A_{\text{eff}_1}^p = \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \left[ \left( g_{n_1, m_1}^x \right)^2 + \left( g_{n_1, m_1}^y \right)^2 \right] \tag{A.89}$$

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}_2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |E(x, y)|^4 dx dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \right|^2 dx dy
\end{aligned} \tag{A.90}$$

Und nach Ausmultiplizieren ergibt sich

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}_2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{n_3, m_3=0}^{F-1} \sum_{n_4, m_4=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{n_3, m_3}^x \mathfrak{g}_{n_4, m_4}^x \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{n_2}^x \Psi_{m_2}^y \Psi_{n_3}^x \Psi_{m_3}^y \Psi_{n_4}^x \Psi_{m_4}^y + \dots \right. \\
&\quad + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \sum_{q_3, p_3=0}^{F-1} \sum_{q_4, p_4=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \mathfrak{g}_{q_3, p_3}^y \mathfrak{g}_{q_4, p_4}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \Psi_{q_2}^x \Psi_{p_2}^y \Psi_{q_3}^x \Psi_{p_3}^y \Psi_{q_4}^x \Psi_{p_4}^y + \dots \\
&\quad + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \Psi_{n_2}^x \Psi_{m_2}^y \Psi_{q_2}^x \Psi_{p_2}^y + \dots \\
&\quad + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \sum_{q_3, p_3=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^y \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \mathfrak{g}_{q_3, p_3}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \Psi_{q_2}^x \Psi_{p_2}^y \Psi_{q_3}^x \Psi_{p_3}^y + \dots \\
&\quad \left. + 6 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \Psi_{n_1}^x \Psi_{m_1}^y \Psi_{q_1}^x \Psi_{p_1}^y \Psi_{n_2}^x \Psi_{m_2}^y \Psi_{q_2}^x \Psi_{p_2}^y \right] dx dy \\
&= \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{n_3, m_3=0}^{F-1} \sum_{n_4, m_4=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{n_3, m_3}^x \mathfrak{g}_{n_4, m_4}^x I_{n_1, n_2, n_3, n_4}^{(A_{\text{eff}})} I_{m_1, m_2, m_3, m_4}^{(A_{\text{eff}})} + \dots \\
&\quad + \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \sum_{q_3, p_3=0}^{F-1} \sum_{q_4, p_4=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \mathfrak{g}_{q_3, p_3}^y \mathfrak{g}_{q_4, p_4}^y I_{q_1, q_2, q_3, q_4}^{(A_{\text{eff}})} I_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(A_{\text{eff}})} + \dots \\
&\quad + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y I_{n_1, q_1, n_2, q_2}^{(A_{\text{eff}})} I_{m_1, p_1, m_2, p_2}^{(A_{\text{eff}})} + \dots \\
&\quad + 2 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \sum_{q_3, p_3=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^y \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y \mathfrak{g}_{q_3, p_3}^y I_{q_1, n_1, q_2, q_3}^{(A_{\text{eff}})} I_{q_1, m_1, p_2, p_3}^{(A_{\text{eff}})} + \dots \\
&\quad + 6 \sum_{n_1, m_1=0}^{F-1} \sum_{q_1, p_1=0}^{F-1} \sum_{n_2, m_2=0}^{F-1} \sum_{q_2, p_2=0}^{F-1} \mathfrak{g}_{n_1, m_1}^x \mathfrak{g}_{q_1, p_1}^y \mathfrak{g}_{n_2, m_2}^x \mathfrak{g}_{q_2, p_2}^y I_{q_1, n_1, q_2, n_2}^{(A_{\text{eff}})} I_{q_1, m_1, q_2, m_2}^{(A_{\text{eff}})}
\end{aligned} \tag{A.91}$$

mit

$$\begin{aligned}
I_{a_1, a_2, a_3, a_4}^{(A_{\text{eff}}), s} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{a_1}^s \Psi_{a_2}^s \Psi_{a_3}^s \Psi_{a_4}^s ds \\
&= \frac{2^{\frac{a_1 + a_2 + a_3 + a_4}{2}}}{\pi \sigma_s^2} \sqrt{\frac{a_1! a_2!}{a_3! a_4!}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ e^{-2 \frac{s^2}{\sigma^2}} \sum_{k=0}^{\min\{a_1, a_2\}} \frac{2^k}{(a_1 - k)! (a_2 - k)! k!} * \dots \right. \\
&\quad \left. * H_{a_1 + a_2 - 2k}^s H_{a_3}^s H_{a_4}^s \right] ds \\
&= \frac{2^{\frac{a_1 + a_2 + a_3 + a_4}{2}}}{\pi^2 \sigma_s^2} \sqrt{\frac{a_1! a_2!}{a_3! a_4!}} \sum_{k=0}^{\min\{a_1, a_2\}} \frac{2^k}{(a_1 - k)! (a_2 - k)! k!} * \dots \\
&\quad * \Gamma(b + 2k - a_1 - a_2) \Gamma(b - a_3) \Gamma(b - a_4)
\end{aligned} \tag{A.92}$$

$$\text{mit } 2b = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 - 2k + 1$$

## A.5 Mathematische Grundlagen

### A.5.1 Vektoranalyse

$$\nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \mathbf{e}_z \tag{A.93}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \tag{A.94}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \times \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{bmatrix} \\
&= \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \mathbf{e}_x + \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \mathbf{e}_y + \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{e}_z
\end{aligned} \tag{A.95}$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \tag{A.96}$$

$$\nabla \times (\mathbf{u}\mathbf{A}) = \nabla \mathbf{u} \times \mathbf{A} + \mathbf{u} \nabla \times \mathbf{A} \quad (\text{A.97})$$

### A.5.2 Hermite-Funktionen $H_n$

Im Folgenden sind die wichtigsten Eigenschaften, Definitionen, Ableitungen und Integrale der Hermite-Funktionen, aus verschiedenen Tabellen zusammengetragen [132, 133]. Für die Lösung einzelner Funktionen werden die Gamma-Funktionen  $\Gamma$  und Laguerre-Funktionen  $L$  benötigt (siehe Abschnitt A.5.3).

Definition:

$$H_n(s) = (-1)^n e^{s^2} \frac{d^n}{ds^n} [e^{-s^2}]$$

$$H_n(s) = \frac{2^n}{\sqrt{n}} \int_{-\infty}^{\infty} (s - jt) e^{-t^2} dt \quad (\text{A.98})$$

Rekursionsformeln:

$$\frac{dH_n(cs)}{ds} = 2cnH_{n-1}(cs)$$

$$H_{n+1}(cs) = 2csH_n(cs) - 2nH_{n-1}(cs) \quad (\text{A.99})$$

Feldheim-Identität:

$$H_n(cs)H_m(cs) = \sum_{k=0}^{\min\{n,m\}} \binom{n}{k} \binom{m}{k} 2^k k! H_{n+m-2k}(cs)$$

$$= n!m! \sum_{k=0}^{\min\{n,m\}} \frac{2^k}{(n-k)!(m-k)!k!} H_{n+m-2k}(cs) \quad (\text{A.100})$$

Integrale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} H_n(cs) H_m(cs) ds = \frac{\sqrt{\pi}}{c} 2^n n! \delta_{n,m} \quad (\text{A.101})$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} \sin(bs) H_n(cs) H_m(cs) = \dots \\
& = \begin{cases} (-1)^{\frac{m-n-1}{2}} 2^n n! \sqrt{\pi} \frac{b^{m-n}}{c^{m-n+1}} e^{-\frac{b^2}{4c^2}} L_n^{m-n} \left( \frac{b^2}{2c^2} \right) & , b > 0; \quad \frac{m-n-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.102})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} \cos(bs) H_n(cs) H_m(cs) = \dots \\
& = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{c} 2^n n! & , b = 0; \quad m = n \\ (-1)^{\frac{m-n}{2}} 2^n n! \sqrt{\pi} \frac{b^{m-n}}{c^{m-n+1}} e^{-\frac{b^2}{4c^2}} L_n^{m-n} \left( \frac{b^2}{2c^2} \right) & , b > 0; \quad \frac{m-n}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.103})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} H_n(cs) H_m(cs) H_q(cs) = \dots \\
& = \begin{cases} \frac{2^{b-1}}{\pi c} \Gamma(b-n) \Gamma(b-m) \Gamma(b-q) & , \frac{b-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.104})
\end{aligned}$$

mit  $2b = n + m + q + 1$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} H_n(cs) H_m(cs) H_q(cs) H_p(cs) = \dots \\
& = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2 s^2} H_q(cs) H_p(cs) \sum_{k=0}^{\min\{n,m\}} \binom{n}{k} \binom{m}{k} 2^k k! H_{m+n-2k}(cs) = \dots \\
& = \begin{cases} \sum_{k=0}^{\min\{n,m\}} \binom{n}{k} \binom{m}{k} 2^k k! \frac{2^{b-1}}{\pi c} \Gamma(b+2k-n-m) \Gamma(b-q) \Gamma(b-p), \frac{b-1}{2} \in \mathbb{Z} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.105})
\end{aligned}$$

mit  $2b = n + m - 2k + q + p + 1$

Ableitungen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial s} \left[ e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} H_n(cs) \right] &= c e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} (-cs H_n(cs) + 2n H_{n-1}(cs)) \\
&= c e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} \left( -\frac{1}{2} H_{n+1}(cs) - n H_{n-1}(cs) + 2n H_{n-1}(cs) \right) \\
&= \frac{c}{2} e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} (2n H_{n-1}(cs) - H_{n+1}(cs))
\end{aligned} \tag{A.106}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial s} \left[ e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} \cos(bs) H_n(cs) \right] &= \dots \\
&= e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} (-b \sin(bs) H_n(cs) - c^2 s \cos(bs) H_n(cs) + 2nc \cos(bs) H_{n-1}(cs)) = \dots \\
&= e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} \left( -b \sin(bs) H_n(cs) + \frac{c}{2} \cos(bs) [2n H_{n-1}(cs) - H_{n+1}(cs)] \right)
\end{aligned} \tag{A.107}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial s^2} \left[ e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} H_n(cs) \right] &= \frac{\partial}{\partial s} \left[ \frac{c}{2} e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} (2n H_{n-1}(cs) - H_{n+1}(cs)) \right] = \dots \\
&= \frac{c^2}{2} e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} \left( -2ncs H_{n-1}(cs) + cs H_{n+1}(cs) + \dots \right. \\
&\quad \left. + 4n(n-1) H_{n-2}(cs) - 2(n+1) H_n(cs) \right) = \dots \\
&= \frac{c^2}{4} e^{-\frac{c^2 s^2}{2}} (4n(n-1) H_{n-2}(cs) - 2(2n+1) H_n(cs) + H_{n+2}(cs))
\end{aligned} \tag{A.108}$$

### A.5.3 Laguerre-Funktionen $L_n^m$

Im Folgenden sind die Definitionen und Relationen zu den Hermite-Funktionen für die Laguerre-Funktionen angegeben.

Definition:

$$L_n^m(s) = \frac{1}{n!} e^s s^{-m} \frac{d^n}{ds^n} [e^{-s} s^{n+m}] \tag{A.109}$$

$$L_n^m(s) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n+m}{n-k} \frac{s^m}{k!} \tag{A.110}$$



Relationen zu Hermite-Funktionen

$$\begin{aligned} H_{2n}(s) &= (-1)^n 2^{2n} n! L_n^{-\frac{1}{2}}(s^2) \\ H_{2n+1}(s) &= (-1)^n 2^{2n+1} n! s L_n^{\frac{1}{2}}(s^2) \end{aligned} \quad (\text{A.111})$$

## A.6 Fourier-Transformation

Es seien  $f(x)$ ,  $g(x)$  im Intervall  $(-\infty, \infty)$  absolut integrierbare und stückweise stetig differenzierbare Funktionen, dann folgt die Fourier-Transformation und Umkehrfunktion zu [24, 134, 135]

$$\begin{aligned} F(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-jux} dx \\ f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(u) e^{jux} du \end{aligned} \quad (\text{A.112})$$

### A.6.1 Rechenregeln für die Fourier-Transformation

Linearität	$a f(x) + b g(x)$	$a F(u) + b G(u)$
Ähnlichkeit	$f(cx)$	$\frac{1}{ c } F\left(\frac{u}{c}\right)$
Verschiebung im Zeitbereich	$f(x-d)$	$F(u) e^{-jud}$
Verschiebung im Frequenzbereich	$f(x) e^{j\Omega x}$	$F(u - \Omega)$
Differentiation im Zeitbereich	$f'(x)$	$j\omega F(u)$
Differentiation im Frequenzbereich	$jx f(x)$	$F'(u)$
Faltung	$f(x) * g(x)$	$F(u) G(u)$

### A.6.2 Fourier-Transformation wichtiger Funktionen $f(x)$ im $\mathbb{R}^1$

$f(x)$	$F(u)$
$\delta(x)$	1
1	$2\pi\delta(u)$
$\begin{cases} 1 & , x > 0 \\ 0 & , x < 0 \end{cases}$	$\frac{1}{ju} + \pi\delta(u)$
$\cos(\Omega x)$	$\pi[\delta(u + \Omega) + \delta(u - \Omega)]$
$\sin(\Omega x)$	$j\pi[\delta(u + \Omega) - \delta(u - \Omega)]$
$\begin{cases} (a^2 - x^2)^{-\frac{1}{2}} & ,  x  < a \\ 0 & ,  x  > a \end{cases}$	$\pi J_0(au)$
$\begin{cases} x(a^2 - x^2)^{-\frac{1}{2}} & ,  x  < a \\ 0 & ,  x  > a \end{cases}$	$-ja\pi J_1(au)$

### A.6.3 Fourier-Transformation wichtiger Funktionen $f(x,y)$ im $\mathbb{R}^2$

Mit Fourier-Transformation und Umkehrfunktion nach [24, 134, 135]

$$F(u, v) = \iint f(x, y) e^{-j(ux+vy)} dx dy \quad f(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \iint F(u, v) e^{j(ux+vy)} du dv \quad (\text{A.113})$$

	$f(x,y)$	$F(u,v)$
Rechteck	$\begin{cases} 1 & ,  x  < a,  y  < b \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$	$\frac{4 \sin(au) \sin(bv)}{uv}$
Streifen	$\begin{cases} 1 & ,  x  < a \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$	$\frac{4\pi \sin(au)}{u} \delta(v)$
Zylinder	$\begin{cases} 1 & , x^2 + y^2 < a^2 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$	$2\pi a^2 \frac{J_1(ka)}{ka} \quad , k = \sqrt{u^2 + v^2}$

## A.7 Fundamentale Konstanten

Name	Symbol	Wert
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$c, c_0$	$2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Permeabilitätskonstante	$\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$
Dielektrizitätskonstante	$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	$8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Plancksches-Wirkungsquantum	$h$	$6,6260755 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Elementarladung	$e$	$1,60217733 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Ruhemasse des Elektrons	$m_e$	$9,1093897 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Avogadro-Konstante	$N_A$	$6,0221367 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Gaskonstante	$R$	$8,134510 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Boltzmannkonstante	$K = R/N_A$	$1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$



## B Literatur

- [1] A. Chutinan and S. Noda, "Waveguides and waveguide bends in two-dimensional photonic crystal slabs," *Physical Review B*, vol. 62, no. 7, pp. 4488-4492, 2000.
- [2] E. Istrate and E. H. Sargent, "Photonic crystal waveguide analysis using interface boundary conditions," *Ieee Journal of Quantum Electronics*, vol. 41, no. 3, pp. 461-467, 2005.
- [3] A. Chutinan and S. Noda, "Analysis of waveguides and waveguide bends in photonic crystal slabs with triangular lattice," *Japanese Journal of Applied Physics Part 2-Letters*, vol. 39, no. 6B, pp. L595-L596, 2000.
- [4] M. Loncar, D. Nedeljkovic, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer, and T. P. Pearsall, "Waveguiding in planar photonic crystals," *Applied Physics Letters*, vol. 77, no. 13, pp. 1937-1939, 2000.
- [5] M. Loncar, T. Doll, J. Vuckovic, and A. Scherer, "Design and fabrication of silicon photonic crystal optical waveguides," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 18, no. 10, pp. 1402-1411, 2000.
- [6] S. G. Johnson, P. R. Villeneuve, S. H. Fan, and J. D. Joannopoulos, "Linear waveguides in photonic-crystal slabs," *Physical Review B*, vol. 62, no. 12, pp. 8212-8222, 2000.
- [7] O. Painter, J. Vuckovic, and A. Scherer, "Defect modes of a two-dimensional photonic crystal in an optically thin dielectric slab," *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, vol. 16, no. 2, pp. 275-285, 1999.
- [8] K. J. Vahala, "Optical microcavities," *Nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 839-846, 2003.
- [9] J. Vuckovic, M. Loncar, H. Mabuchi, and A. Scherer, "Design of photonic crystal microcavities for cavity QED," *Physical Review E*, vol. 65, no. 1, pp. -, 2002.
- [10] Y. Akahane, T. Asano, B. S. Song, and S. Noda, "High-Q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal," *Nature*, vol. 425, no. 6961, pp. 944-947, 2003.
- [11] N. Venkataraman, M. T. Gallagher, C. M. Smith, D. Müller, J. A. West, K. W. Koch, and J. C. Fajardo, "Low loss (13 db/km) air core photonic bandgap fiber," *28th European Conference on Optical Communication*, vol. ECOC'02, no. post-deadline paper PD1.1., 2002.
- [12] J. C. Knight, "Photonic crystal fibres," *Nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 847-851, 2003.
- [13] P. J. Roberts, F. Couny, H. Sabert, B. J. Mangan, D. P. Williams, L. Farr, M. W. Mason, A. Tomlinson, T. A. Birks, J. C. Knight, and P. S. J. Russell, "Ultimate low loss of hollow-core photonic crystal fibres," *Optics Express*, vol. 13, no. 1, pp. 236-244, 2005.
- [14] P. Russell, "Photonic crystal fibers," *Science*, vol. 299, no. 5605, pp. 358-362, 2003.
- [15] D. G. Ouzounov, F. R. Ahmad, D. Muller, N. Venkataraman, M. T. Gallagher, M. G. Thomas, J. Silcox, K. W. Koch, and A. L. Gaeta, "Generation of megawatt optical solitons in hollow-core photonic band-gap fibers," *Science*, vol. 301, no. 5640, pp. 1702-1704, 2003.
- [16] M. Faraday and A. J. v. Oettingen, *Experimental-Untersuchungen über Elektrizität*. Leipzig: Engelmann, 1896. -
- [17] R. A. R. Tricker, *Frühe Elektrodynamik: das erste Stromgesetz*. Berlin: Akademie-Verl., 1974. -
- [18] R. A. R. Tricker, *Die Beiträge von Faraday und Maxwell zur Elektrodynamik*. Berlin: Akademie-Verl., 1974. -

- [19] J. C. Maxwell and M. B. Weinstein, *Lehrbuch der Electricität und des Magnetismus: in zwei Bänden*. Berlin: Springer, 1883. -
- [20] J. D. Jackson and K. Müller, *Klassische Elektrodynamik*, 3., überarb. Aufl. ed. Berlin [u.a.]: de Gruyter, 2002. - ISBN 3110165023
- [21] P. Lorrain, D. R. Corson, and F. c. Lorrain, *Elektromagnetische Felder und Wellen: unter Berücksichtigung elektrischer Stromkreise*. Berlin [u.a.]: de Gruyter, 1995. - 3110122324
- [22] E. Hecht, *Optik*, 3., vollst. Überarb. Aufl ed. München [u.a.]: Oldenbourg, 2001. - 3486249177 (Pp.)
- [23] V. I. Smirnov, *Lehrgang der höheren Mathematik: Teil 2*. Berlin: Dt. Verl. d. Wiss., 1964. -
- [24] I. j. N. Bronéstejn, G. Grosche, and E. Zeidler, *Teubner-Taschenbuch der Mathematik*. Stuttgart [u.a.]: Teubner, 1995. -
- [25] W. I. Smirnow, *Lehrgang der höheren Mathematik Teil II*, 13., unveränd. Aufl ed. Berlin: Dt. Verl. der Wiss., 1977. -
- [26] K. Meyberg and P. Vachenaue, *Differentialgleichungen, Funktionentheorie, Fourier-Analysis, Variationsrechnung*, 4., korrig. Aufl., 1., korr. Nachdr ed. Berlin [u.a.]: Springer, 2003. - 3540418512
- [27] H. J. Dirschmid, *Mathematische Grundlagen der Elektrotechnik*, 3., verb. Aufl ed. Braunschweig u.a.: Vieweg, 1988. - 3528230347
- [28] E. W. Weisstein, *CRC concise encyclopedia of mathematics*, 2. ed ed. Boca Raton, Fla. [u.a.]: Chapman & Hall/CRC, 2003. - 1584883472 (hbk.)
- [29] T. Haas, S. Belau, and T. Doll, "Realistic monomode air-core honeycomb photonic bandgap fiber with pockets," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 23, no. 9, pp. 2702-2706, 2005.
- [30] S. P. Guo and S. Albin, "Simple plane wave implementation for photonic crystal calculations," *Optics Express*, vol. 11, no. 2, pp. 167-175, 2003.
- [31] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic crystals: molding the flow of light*. Princeton, N.J.: Princeton University Press, 1995. - ISBN 0691037442
- [32] M. Plihal and A. A. Maradudin, "Photonic band structure of two-dimensional systems: The triangular lattice," *Physical Review B*, vol. 44, no. 16, pp. 8565-8570, 1991.
- [33] A. A. Maradudin and A. R. McGurn, "Out-of-Plane Propagation of Electromagnetic-Waves in a 2-Dimensional Periodic Dielectric Medium," *Journal of Modern Optics*, vol. 41, no. 2, pp. 275-284, 1994.
- [34] <http://nobelprize.org/physics/laureates/1915/index.html>.
- [35] A. Sommerfeld and F. Bopp, *Optik*, 3., durchges. Aufl ed. Thun [u.a.]: Deutsch, 1964. -
- [36] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, 13., korrigierte Aufl ed. München [u.a.]: Oldenbourg, 2002. - 3486272195 (Pb.)
- [37] K. Kopitzki and P. Herzog, *Einführung in die Festkörperphysik*, 5., durchges. Aufl ed. Stuttgart [u.a.]: Teubner, 2004. - 3519430835
- [38] J. M. Ziman and P. Rennert, *Prinzipien der Festkörpertheorie*, Autoris. und gemeinsam mit dem Verf. überarb. dt. Übers., 2. Aufl ed. Zürich [u.a.]: Deutsch, 1992. - 3817112556
- [39] L. e. Brillouin, *Wave propagation in periodic structures: Electric filters and crystal lattices*. New York, NY [u.a.]: McGraw-Hill, 1946. -
- [40] M. Born and T. v. Karaman, "Über die Schwingungen in Raumgittern," *Physikalische Zeitschriften*, no. 8, pp. 297-309, 1912.
- [41] M. Born and T. v. Karaman, "Zur Theorie der spezifischen Wärme," *Physikalische Zeitschriften*, vol. 14, no. 15-19, 1913.
- [42] D. Hilbert, *Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen*, 2. anast. gedr. Auflage ed. Leipzig;Berlin: Teubner, 1924. -
- [43] R. Courant and D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik I*. Berlin;Göttingen;[u.a.]: Springer, 1968. - 354004177X

- [44] M. Born and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik," *Zeitschrift für Physik*, vol. 34, no. 858-888, 1925.
- [45] M. Born, W. Heisenberg, and P. Jordan, "Zur Quantenmechanik II," *Zeitschrift für Physik*, vol. 35, no. 557-615, 1925.
- [46] W. Heisenberg, "Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen," *Zeitschrift für Physik*, vol. 33, no. 1, pp. 879-893, 1925.
- [47] E. E. Witmer and L. Rosenfeld, "Über die Beugung von de Broglieschen Wellen an Kristallgittern," *Zeitschrift für Physik*, vol. 48, no. 7, pp. 530-540, 1928.
- [48] F. Bloch, "Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern," *Zeitschrift für Physik*, vol. 52, no. 555-600, 1928.
- [49] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, 7., (expanded) ed ed. Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, 2002. - 0521642221
- [50] P. Yeh, *Optical waves in layered media*. New York, NY [u.a.]: Wiley, 1988. - ISBN 0471828661
- [51] Y. Fink, J. N. Winn, S. H. Fan, C. P. Chen, J. Michel, J. D. Joannopoulos, and E. L. Thomas, "A dielectric omnidirectional reflector," *Science*, vol. 282, no. 5394, pp. 1679-1682, 1998.
- [52] J. P. Dowling, "Optical physics - Mirror on the wall: You're omnidirectional after all?" *Science*, vol. 282, no. 5395, pp. 1841-1842, 1998.
- [53] D. N. Chigrin, A. V. Lavrinenko, D. A. Yarotsky, and S. V. Gaponenko, "All-dielectric one-dimensional periodic structures for total omnidirectional reflection and partial spontaneous emission control," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 17, no. 11, pp. 2018-2024, 1999.
- [54] A. Bruyant, G. Lerondel, P. J. Reece, and M. Gal, "All-silicon omnidirectional mirrors based on one-dimensional photonic crystals," *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 19, pp. 3227-3229, 2003.
- [55] H. Y. Lee, H. Makino, T. Yao, and A. Tanaka, "Si-based omnidirectional reflector and transmission filter optimized at a wavelength of 1.55  $\mu\text{m}$ ," *Applied Physics Letters*, vol. 81, no. 24, pp. 4502-4504, 2002.
- [56] C. P. Yu and H. C. Chang, "Yee-mesh-based finite difference eigenmode solver with PML absorbing boundary conditions for optical waveguides and photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 12, no. 25, pp. 6165-6177, 2004.
- [57] C. P. Yu and H. C. Chang, "Compact finite-difference frequency-domain method for the analysis of two-dimensional photonic crystals," *Optics Express*, vol. 12, no. 7, pp. 1397-1408, 2004.
- [58] C. P. Yu and H. C. Chang, "Applications of the finite difference mode solution method to photonic crystal structures," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 36, no. 1-3, pp. 145-163, 2004.
- [59] A. Taflov, *Advances in computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Boston [u.a.]: Artech House, 1998. - 0890068348
- [60] S. P. Guo, F. Wu, S. Albin, and R. S. Rogowski, "Photonic band gap analysis using finite-difference frequency-domain method," *Optics Express*, vol. 12, no. 8, pp. 1741-1746, 2004.
- [61] C. Hermann, "Three dimensional finite difference time domain simulations of photonic crystals," 2004.
- [62] A. Taflov and S. C. Hagness, *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*, 3. ed ed. Boston, Mass. [u.a.]: Artech House, 2005. - 1580538320 (alk. paper)
- [63] T. Lingel and F. H. Uhlmann, *On the use of R-functions for the preprocess of a finite-difference time-domain programm*, 1998.
- [64] Z. Zhang and S. Satpathy, "Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell's equations," *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 21, pp. 2650-2653, 1990.

- [65] R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, J. D. Joannopoulos, and O. L. Alerhand, "Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials," *Physical Review B*, vol. 48, no. 11, pp. 8434-8437, 1993.
- [66] K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, "Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures," *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 25, pp. 3152-3155, 1990.
- [67] S. Satpathy, Z. Zhang, and M. R. Salehpour, "Theory of photon bands in three-dimensional periodic dielectric structures," *Physical Review Letters*, vol. 64, no. 11, pp. 1239-1242, 1990.
- [68] K. M. Leung and Y. F. Liu, "Full Vector Wave Calculation of Photonic Band Structures in Face-Centered-Cubic Dielectric Media," *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 21, pp. 2646-2649, 1990.
- [69] A. W. Snyder and J. D. Love, *Optical waveguide theory*. London: Chapman and Hall, 1983. - 0412099500
- [70] D. Marcuse, *Theory of dielectric optical waveguides*, 2. ed ed. Boston [u.a.]: Acad. Press [u.a.], 1991. - 0124709516
- [71] Z. M. Zhu and T. G. Brown, "Analysis of the space filling modes of photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 8, no. 10, pp. 547-554, 2001.
- [72] T. M. Monro, D. J. Richardson, N. G. R. Broderick, and P. J. Bennett, "Holey optical fibers: An efficient modal model," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 17, no. 6, pp. 1093-1102, 1999.
- [73] W. Zhi, G. B. Ren, and S. Q. Lou, "A novel supercell overlapping method for different photonic crystal fibers," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 22, no. 3, pp. 903-916, 2004.
- [74] T. A. Birks, J. C. Knight, and P. S. Russell, "Endlessly single-mode photonic crystal fiber," *Optics Letters*, vol. 22, no. 13, pp. 961-963, 1997.
- [75] Z. Wang, G. B. Ren, S. Q. Lou, and S. S. Jian, "Supercell lattice method for photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 11, no. 9, pp. 980-991, 2003.
- [76] A. W. Snyder and J. D. Love, *Optical waveguide theory*, Reprinted ed. London [u.a.]: Chapman & Hall, 1995. - ISBN 0412242508
- [77] Z. Wang, G. B. Ren, S. Q. Lou, and S. S. Jian, "Loss properties due to Rayleigh scattering in different types of fiber," *Optics Express*, vol. 11, no. 1, pp. 39-47, 2003.
- [78] Z. Wang, G. B. Ren, S. Q. Lou, W. J. Liang, and S. P. Guo, "Compact supercell method based on opposite parity for Bragg fibers," *Optics Express*, vol. 11, no. 26, pp. 3542-3549, 2003.
- [79] Z. Wang, G. B. Ren, S. Q. Lou, and S. S. Jian, "Dependence of mode characteristics on the central defect in elliptical hole photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 11, no. 17, pp. 1966-1979, 2003.
- [80] T. M. Monro, P. J. Bennett, N. G. R. Broderick, and D. J. Richardson, "Holey fibers with random cladding distributions," *Optics Letters*, vol. 25, no. 4, pp. 206-208, 2000.
- [81] T. M. Monro, D. J. Richardson, N. G. R. Broderick, and P. J. Bennett, "Modeling large air fraction holey optical fibers," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 18, no. 1, pp. 50-56, 2000.
- [82] R. Guobin, W. Zhi, L. Shuqin, L. Yan, and J. Shuisheng, "Full-vectorial analysis of complex refractive-index photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 12, no. 6, pp. 1126-1135, 2004.
- [83] Y. L. Hsueh, E. S. T. Hu, M. E. Marhic, and L. G. Kazovsky, "Opposite-parity orthonormal function expansion for efficient full-vectorial modeling of holey optical fibers," *Optics Letters*, vol. 28, no. 14, pp. 1188-1190, 2003.
- [84] F. Mitschke, *Glasfasern: Physik und Technologie*, 1. Aufl ed. Heidelberg: Elsevier, Spektrum Akademischer Verl., 2005. - 3827416299 (Gb.)
- [85] J. A. Buck, *Fundamentals of optical fibers*, 2. ed ed. New York [u.a.]: Wiley, 2004. - 0471221910
- [86] I. H. Malitson, "Interspecimen Comparison of the refractive index of fused silica," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 55, no. 1205-1209, 1965.
- [87] A. Ferrando, E. Silvestre, P. Andres, J. J. Miret, and M. V. Andres, "Designing the properties of dispersion-flattened photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 9, no. 13, pp. 687-697, 2001.



- [88] L. P. Shen, W. P. Huang, and S. S. Jian, "Design of photonic crystal fibers for dispersion-related applications," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 21, no. 7, pp. 1644-1651, 2003.
- [89] W. H. Reeves, J. C. Knight, P. S. J. Russell, and P. J. Roberts, "Demonstration of ultra-flattened dispersion in photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 10, no. 14, pp. 609-613, 2002.
- [90] K. Saitoh, M. Koshiba, T. Hasegawa, and E. Sasaoka, "Chromatic dispersion control in photonic crystal fibers: application to ultra-flattened dispersion," *Optics Express*, vol. 11, no. 8, pp. 843-852, 2003.
- [91] N. A. Mortensen, J. R. Folkenberg, M. D. Nielsen, and K. P. Hansen, "Modal cutoff and the V parameter in photonic crystal fibers," *Optics Letters*, vol. 28, no. 20, pp. 1879-1881, 2003.
- [92] M. D. Nielsen and N. A. Mortensen, "Photonic crystal fiber design based on the V-parameter," *Optics Express*, vol. 11, no. 21, pp. 2762-2768, 2003.
- [93] G. P. Agrawal, *Nonlinear fiber optics*, 3. ed ed. San Diego [u.a.]: Academic Press, 2001. - 0120451433 (acid-free paper)
- [94] N. A. Mortensen, "Effective area of photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 10, no. 7, pp. 341-348, 2002.
- [95] A. D. Fitt, K. Furusawa, T. M. Monro, and C. P. Please, "Modeling the fabrication of hollow fibers: Capillary drawing," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 19, no. 12, pp. 1924-1931, 2001.
- [96] M. G. Forest and H. Zhou, "Unsteady analyses of thermal glass fibre drawing processes," *European Journal of Applied Mathematics*, vol. 12, no. 479-496, 2001.
- [97] Y. Matsuura, R. Kasahara, T. Katagiri, and M. Miyagi, "Hollow infrared fibers fabricated by glass-drawing technique," *Optics Express*, vol. 10, no. 12, pp. 488-492, 2002.
- [98] K. Lyytikainen, S. T. Huntington, A. L. G. Carter, P. McNamara, S. Fleming, J. Abramczyk, I. Kaplin, and G. Schotz, "Dopant diffusion during optical fibre drawing," *Optics Express*, vol. 12, no. 6, pp. 972-977, 2004.
- [99] J. Broeng, S. E. Barkou, A. Bjarklev, J. C. Knight, T. A. Birks, and P. S. Russell, "Highly increased photonic band gaps in silica/air structures," *Optics Communications*, vol. 156, no. 4-6, pp. 240-244, 1998.
- [100] J. Broeng, T. Sondergaard, S. E. Barkou, P. M. Barbeito, and A. Bjarklev, "Waveguidance by the photonic bandgap effect in optical fibres," *Journal of Optics a-Pure and Applied Optics*, vol. 1, no. 4, pp. 477-482, 1999.
- [101] M. Yan and P. Shum, "Air guiding with honeycomb photonic bandgap fiber," *Ieee Photonics Technology Letters*, vol. 17, no. 1, pp. 64-66, 2005.
- [102] M. Yan, P. Shum, and J. Hu, "Design of air-guiding honeycomb photonic bandgap fiber," *Optics Letters*, vol. 30, no. 5, pp. 465-467, 2005.
- [103] J. Broeng, S. E. Barkou, T. Sondergaard, and A. Bjarklev, "Analysis of air-guiding photonic bandgap fibers," *Optics Letters*, vol. 25, no. 2, pp. 96-98, 2000.
- [104] R. F. Cregan, B. J. Mangan, J. C. Knight, T. A. Birks, P. S. Russell, P. J. Roberts, and D. C. Allan, "Single-mode photonic band gap guidance of light in air," *Science*, vol. 285, no. 5433, pp. 1537-1539, 1999.
- [105] K. Nagayama, M. Kakui, M. Matsui, T. Saitoh, and Y. Chigusa, "Ultra-low-loss (0.1484 dB/km) pure silica core fibre and extension of transmission distance," *Electronics Letters*, vol. 38, no. 20, pp. 1168-1169, 2002.
- [106] D. Ferrarini, L. Vincetti, M. Zoboli, A. Cucinotta, and S. Selleri, "Leakage properties of photonic crystal fibers," *Optics Express*, vol. 10, no. 23, pp. 1314-1319, 2002.
- [107] K. Saitoh and M. Koshiba, "Leakage loss and group velocity dispersion in air-core photonic bandgap fibers," *Optics Express*, vol. 11, no. 23, pp. 3100-3109, 2003.
- [108] H. K. Kim, M. J. F. Digonnet, G. S. Kino, J. W. Shin, and S. H. Fan, "Simulations of the effect of the core ring on surface and air-core modes in photonic bandgap fibers," *Optics Express*, vol. 12, no. 15, pp. 3436-3442, 2004.

- [109] H. K. Kim, J. Shin, S. H. Fan, M. J. F. Digonnet, and G. S. Kino, "Designing air-core photonic-bandgap fibers free of surface modes," *Ieee Journal of Quantum Electronics*, vol. 40, no. 5, pp. 551-556, 2004.
- [110] S. Ogawa, M. Imada, S. Yoshimoto, M. Okano, and S. Noda, "Control of Light Emission by 3D Photonic Crystals," *Science*, vol. 305, no. 5681, pp. 227-229, 2004.
- [111] J. Schilling, J. White, A. Scherer, G. Stupian, R. Hillebrand, and U. Gosele, "Three-dimensional macroporous silicon photonic crystal with large photonic band gap," *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 1, pp. -, 2005.
- [112] A. Chutinan and S. Noda, "Design for waveguides in three-dimensional photonic crystals," *Japanese Journal of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers*, vol. 39, no. 4B, pp. 2353-2356, 2000.
- [113] M. H. Qi, E. Lidorikis, P. T. Rakich, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, E. P. Ippen, and H. I. Smith, "A three-dimensional optical photonic crystal with designed point defects," *Nature*, vol. 429, no. 6991, pp. 538-542, 2004.
- [114] C. T. Chan, Q. L. Yu, and K. M. Ho, "Order-N spectral method for electromagnetic waves," *Physical Review B*, vol. 51, no. 23, pp. 16635-16642, 1995.
- [115] M. L. Povinelli, S. G. Johnson, S. H. Fan, and J. D. Joannopoulos, "Emulation of two-dimensional photonic crystal defect modes in a photonic crystal with a three-dimensional photonic band gap," *Physical Review B*, vol. 64, no. 7, pp. art. no.-075313, 2001.
- [116] S. Fan, P. R. Villeneuve, R. D. Meade, and J. D. Joannopoulos, "Design of three dimensional photonic crystals at submicron lengthscales," *Applied Physics Letters*, vol. 65, no. 11, pp. 1466-1468, 1994.
- [117] S. Noda, N. Yamamoto, H. Kobayashi, M. Okano, and K. Tomoda, "Optical properties of three-dimensional photonic crystals based on III-V semiconductors at infrared to near-infrared wavelengths," *Applied Physics Letters*, vol. 75, no. 7, pp. 905-907, 1999.
- [118] S. Noda, K. Tomoda, N. Yamamoto, and A. Chutinan, "Full three-dimensional photonic bandgap crystals at near-infrared wavelengths," *Science*, vol. 289, no. 5479, pp. 604-606, 2000.
- [119] R. Hillebrand and U. Gosele, "Woodpiles for photons," *Science*, vol. 305, no. 5681, pp. 187-188, 2004.
- [120] Y. Lin, P. R. Herman, and K. Darmawikarta, "Design and holographic fabrication of tetragonal and cubic photonic crystals with phase mask: toward the mass-production of three-dimensional photonic crystals," *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 7, pp. -, 2005.
- [121] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus, and I. Kim, "Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser," *Science*, vol. 284, no. 5421, pp. 1819-1821, 1999.
- [122] Y. Akahane, T. Asano, B. S. Song, and S. Noda, "Investigation of high-Q channel drop filters using donor-type defects in two-dimensional photonic crystal slabs," *Applied Physics Letters*, vol. 83, no. 8, pp. 1512-1514, 2003.
- [123] A. A. Maradudin and A. R. McGurn, "Photonic band structure of a truncated, two-dimensional, periodic dielectric medium," *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, vol. 10, no. 2, pp. 307-313, 1993.
- [124] Z. Y. Li and Y. N. Xia, "Omnidirectional absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals," *Physical Review B*, vol. 64, no. 15, pp. -, 2001.
- [125] M. M. Sigalas, R. Biswas, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis, "Theoretical investigation of off-plane propagation of electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals," *Physical Review B*, vol. 58, no. 11, pp. 6791-6794, 1998.
- [126] T. Haas, A. Hesse, and T. Doll, "Omnidirectional 2D photonic crystal band gap structure," *Physical Review B*, vol. 73, no. 4, pp. 045130-7, 2006.
- [127] C. M. Anderson and K. P. Giapis, "Larger two-dimensional photonic band gaps," *Physical Review Letters*, vol. 77, no. 14, pp. 2949-2952, 1996.

- [128] T. Haas and T. Doll, "Photonic nanotool for surface scan and modification," VDI-Berichte, vol. 1839, no. 193-196, 2004.
- [129] J. D. Jackson and K. Müller, *Klassische Elektrodynamik*, 2. verb. Aufl., Nachdr ed. Berlin [u.a.]: de Gruyter, 1985. - 3110095793
- [130] D. Cassagne, C. Jouanin, and D. Bertho, "Hexagonal photonic-band-gap structures," Physical Review B, vol. 53, no. 11, pp. 7134-7142, 1996.
- [131] H. S. Sözüer, J. W. Haus, and R. Inguva, "Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method," Physical Review B, vol. 45, no. 24, pp. 13962-13972, 1992.
- [132] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, and A. Jeffrey, *Table of integrals, series, and products*, 5. ed. San Diego [u.a.]: Academic Press, 1994. - ISBN 012294755X
- [133] A. P. Prudnikov, Y. A. Bryckov, and O. I. Marichev, *Integrals and series*. New York, NY [u.a.]: Gordon and Breach Science Publ., 1986. - ISBN 2881247369
- [134] L. Rade, B. Westergren, and P. Vachenauer, *Springers mathematische Formeln: Taschenbuch für Ingenieure, Naturwissenschaftler, Informatiker, Wirtschaftswissenschaftler*, 3., durchges. Aufl ed. Berlin [u.a.]: Springer, 2000. - 3540675051
- [135] E. Zeidler, G. u. Grosche, and I. j. N. Bronstein, *Teubner-Taschenbuch der Mathematik*. Stuttgart [u.a.]: Teubner, 1996. - 3815420016



## **Danksagung**

Herrn Prof. T. Doll danke ich sehr herzlich für die Themenstellung, die intensive und begeisternde Betreuung der Arbeit und die Förderung meiner Beiträge und Person.

Mein Dank gilt weiterhin allen Mitarbeitern des Institutes, die mir während meiner Tätigkeit und bei der Verwirklichung dieser Arbeit unterstützten zur Seite gestanden haben.

Des Weiteren gilt mein Dank all denen, die mich bei der Korrektur von Artikeln, Postern, allen anderen Schriftstücken und dieser Arbeit unterstützten.



# Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise entgeltlich/unentgeltlich geholfen:

1. ....
2. ....
3. ....

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder anderer Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalte der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ich bin darauf hingewiesen worden, dass die Unrichtigkeit der vorstehenden Erklärung als Täuschungsversuch angesehen wird und den erfolglosen Abbruch des Promotionsverfahrens zu Folge hat.

Ilmenau, den 01.06.2006

(Ort, Datum)

---

(Unterschrift)





# Thesen

- Eine einfache Berechnung der Transmission und Reflektion eines eindimensionalen Kristalls ist über die 2x2-Matrix-Methode gegeben.
- Die Erweiterung auf einen unendlich ausgedehnten photonischen Kristall erlaubt die Berechnung von omnidirektionalen Bandstrukturen über alle Raumwinkel.
- Die analytische Lösung der Fourier-Transformation für unterschiedliche Kristallgitter ermöglicht eine effiziente Lösung der ebenen Wellenmethode.
- Unter der Ausnutzung der Translationseigenschaften des Gitters und der Eigenschaften der Fourier-Transformation wird eine Berechnung des Modenverhaltens in einer Defektstruktur möglich.
- Eine effektive Lösung von photonischen Lichtwellenleitern kann in Anlehnung an die ebene Wellenmethode durch die Lösung der transversalen Wellengleichung erfolgen.
- Die analytische Lösung der Integrale der transversalen Wellengleichung mit Hermite-Gauß-Funktionen entkoppelt die Lösung der Eigenwertgleichung von der Fourier-Transformation des Gitters.
- Die Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften verringert das Eigenwertproblem und beschleunigt die Berechnung um den Faktor 16.
- Bei der Herstellung von photonischen Kristallen entstehen zwischen den Kapillaren „Taschen“, die die optischen Eigenschaften maßgeblich beeinflussen.
- Der reale Kapillarlufthwellenleiter vergrößert die relative Bandlücke im Vergleich zu den honigwabenartigen Gittern und der Approximation der Taschenstruktur durch Zylinder.
- Bei realen honigwabenartigen Kapillarlufthwellenleitern existiert einzig die fundamentale Monomode in der photonischen Bandlücke, was den Einfluss von herstellungsbedingten Fluktuationen reduziert.
- Die Lösung der ebenen Wellenmethode mit einem Wellenvektor in z-Richtung mit  $k_z = k_0 \sin(\theta)$  ermöglicht die Berechnung von omnidirektionalen Kristallen.
- Es werden erstmals omnidirektionale Bandstrukturen für ein honigwabenartiges, hexagonales und quadratisches Gitter über den technologisch interessanten Bereich durch die Variation der Radien und der unterschiedlichen Brechungsindizes gezeigt.
- Die Kombination der verschiedenen photonischen Kristallstrukturen ermöglicht eine Realisierung eines neuen Nahfeld-Tools für die Visualisierung bei gleichzeitiger Manipulation der Oberfläche.